

UNIVERSIDAD CARLOS III DE MADRID

ESCUELA POLITÉCNICA SUPERIOR



DEPARTAMENTO DE INGENIERÍA TÉRMICA Y DE FLUIDOS

INGENIERÍA INDUSTRIAL: TECNOLOGÍAS ENERGÉTICAS

PROYECTO FIN DE CARRERA

**ANÁLISIS DE LA ESTRATEGIA DE MODELADO DE GASIFICADORES DE
BIOMASA EN LECHO FLUIDIZADO**

AUTOR: RAFAEL TORRES MOYANO

JULIO 2012

TUTOR: ALBERTO GÓMEZ GARCÍA

Agradecimientos

A mi familia, por estar siempre a mi lado.

A Alberto, por su dedicación y atención constante.

INDICE

1. OBJETIVOS	7
2. ESTADO DEL ARTE	9
2.1 Motivación del proyecto	9
2.2 Biomasa	10
2.2.1 Propiedades de la biomasa.....	12
2.2.2 Ventajas e inconvenientes	15
2.3 Fluidización	16
2.3.1 Propiedades de los lechos fluidizados	18
2.4 Gasificación.....	19
2.4.1 Etapas de la gasificación	20
2.4.2 Tipos de gasificadores	21
3. MODELOS DE SIMULACION	27
3.1 Geometría y Parámetros del reactor	28
3.2 Hipótesis generales	29
3.3 Modelo de equilibrio	30
3.3.1 Reacciones consideradas en el modelo de equilibrio	31
3.3.2 Termodinámica del sistema	31
3.3.3 Estudio preliminar	37
3.3.4 Simulación numérica del modelo de equilibrio.....	39
3.4 Modelo cinético	42
3.4.1 Desarrollo del modelo cinético.....	43
3.4.2 Hipótesis del modelo cinético.....	43
3.4.3 Esquema de las reacciones	44
3.4.4 Ecuaciones de conservación	45
3.4.5 Término del flujo neto	46
3.4.6 Régimen de fluidización.....	46
3.4.7 Simulación numérica del modelo cinético.....	47
3.4.8 Diagrama de flujo: Modelo cinético	50
4. SIMULACIONES Y RESULTADOS	51
4.1 Simulaciones.....	51
4.1.1 Descripción del proceso	51
4.1.2 Variables de operación	52
4.1.3 Análisis comparativo	54
4.1.4 Análisis de sensibilidad	56
4.2 Análisis comparativo	57
4.2.1 Estudio de verificación de modelados	57
4.2.2 Estudio de simulaciones de casos particulares	65
4.3 Análisis de sensibilidad	68
4.3.1 Análisis de sensibilidad. Modelo de equilibrio	68
4.3.2 Análisis de sensibilidad. Modelo cinético	78
4.4 Comparación de ambos modelos (cinético y de equilibrio)	95
5. CONCLUSIONES.....	103
5.1 Líneas Futuras	105
6. REFERENCIAS	107
7. NOMENCLATURA.....	109
Letras griegas.....	110
Subíndices.....	110
8. ANEXOS	111

1. OBJETIVOS

Los principales objetivos en el Proyecto fin de carrera se describen a continuación. Se tratará de cumplir dichos objetivos en cada capítulo del proyecto.

1. Introducir los fundamentos a la gasificación de biomasa en lecho fluidizado. Para ello describiremos sus conceptos fundamentales (Biomasa, fluidización, gasificación), parámetros que la caracterizan, etapas en que se desarrolla y ventajas de su uso.

2. Desarrollo de una aplicación basado en un modelo de equilibrio termodinámico como herramienta de simulación para analizar distintos casos prácticos de utilidad en el campo de investigación y a nivel comercial.

3. Desarrollo de una aplicación basado en un modelo cinético como herramienta de simulación.

4. Realización de simulaciones tanto con el modelo de equilibrio como con el modelo cinético utilizando los parámetros geométricos de una instalación a escala comercial, proceso Winkler y utilizando las variables de estudio de un proceso típico de gasificación.

5. Discusión de los resultados de las tendencias presentadas por las variables operativas para cada modelo predictivo, así como las posibles diferencias de los resultados con trabajos experimentales.

6. Establecer las posibles causas de discrepancias entre los resultados predichos por ambos modelos y los experimentales para poder determinar los puntos fuertes y los puntos débiles de cada modelo, a fin de tratar de dilucidar cuáles pueden ser las principales limitaciones para cada modelo en la simulación del proceso objeto de estudio.

7. Definir unas pautas para la mejora de este tipo de herramientas de simulación para el ahorro de coste de fabricación y experimentación de tales reactores.

2. ESTADO DEL ARTE

2.1 Motivación del proyecto

Hoy en día el mundo tiene un gran reto, la obtención de energía con menor coste e impacto ambiental. El nivel de vida actual de la población mundial se ha alcanzado gracias al desarrollo de fuentes de energía fósiles. Esto ha llevado a la aparición de dos grandes problemas, el primero que dichas fuentes de energía fósil se encuentran casi agotadas en el mundo, y la segunda que los contaminantes generados por los combustibles fósiles están afectando al planeta, a través del cambio climático y otra serie de consecuencias tanto en la salud como en el medio ambiente.

Con respecto al problema del agotamiento de los recursos fósiles nadie sabe con exactitud cuando se acabarán dichos recursos. Con el avance de la tecnología siempre se localizan nuevos yacimientos, se explotan yacimientos que en un principio eran inviables su explotación. De todas formas con el crecimiento actual de consumo de energía se estima que dichas reservas no aguantaran más de 50 años para el petróleo y 200 años para el carbón. La Humanidad tendrá que estar preparada cuando estén agotados dichos recursos fósiles para obtener energía a partir de otras fuentes.

Respecto a la problemática del cambio climático los científicos han demostrado un aumento de la temperatura global de la tierra debido a las emisiones de gases que se producen por la quema de combustibles fósiles. Los científicos han podido observar claramente un retroceso de los hielos polares y un avance de las zonas desérticas.

Debido a los problemas de agotamiento de recursos energéticos y el cambio climático del planeta la población mundial esta empezando a concienciarse de la importancia de desarrollar nuevos sistemas que aprovechen las energías renovables para poder reducir la dependencia de los recursos fósiles y reducir las emisiones de gases a la atmósfera.

Las energías renovables parecen que se han convertido en una de las soluciones más accesibles hoy día a la problemática del cambio climático y el agotamiento de recursos fósiles. No obstante las energías renovables todavía hoy presentan grandes inconvenientes: Baja densidad energética, estacionalidad, discontinuidad y baja rentabilidad debido al bajo rendimiento de las instalaciones con respecto a las de combustibles fósiles.

Entre las energías renovables mas desarrolladas hoy en día se encuentran:

1. Energía solar, tanto para la producción de calor (termosolar) como para la producción de electricidad (fotovoltaica). Es una fuente de energía de baja densidad, discontinua ya que solo se produce energía por el día, y de gran coste de instalación.
2. Energía Hidráulica: aprovecha la energía potencial del agua almacenada a cierta altura para mover una turbina que genera electricidad.
3. Energía mareomotriz: Aprovecha la energía de las mareas (olas y corrientes submarinas) para generar electricidad.
4. Energía geotérmica: aprovecha en calor interno de la tierra.
5. Biomasa: Consiste en la utilización de materia de origen vegetal sobrante y ha de ser eliminada (restos de madera, diferentes tipos de cosecha, residuos urbanos, en otros casos cultivos sembrados para su consumo en biocombustible...etc.) para ser quemada como combustible. Aunque este tipo de energía no puede considerarse limpia puesto que genera CO₂, es cierto que el CO₂ emitido es comparable al absorbido por la planta en la fotosíntesis durante toda su vida, por lo tanto el balance de emisiones es aproximadamente 0. La biomasa puede quemarse directamente para producir energía o transformarse en un gas que puede usarse en cámaras de combustión, calderas sustituyendo a combustibles de origen fósil como el gas natural, gasóleo, etc.

En el presente proyecto estudiaremos como transformar la biomasa en gas de síntesis (syngas) considerando la elección de un proceso de gasificación mediante lecho fluidizado burbujeante.

2.2 Biomasa

Biomasa es el término con el que se denomina a todo tipo de material orgánico de origen vegetal, incluyendo en este origen algas, árboles y cultivos. Estas plantas acumulan energía solar en forma de energía química producto de la combinación de CO₂, aire, agua y luz del sol, por medio de la fotosíntesis. Cuando la biomasa sufre un proceso de combustión, digestión o descomposición dichos enlaces químicos se rompen dando lugar a moléculas de carbono, oxígeno e hidrógeno mas una cierta cantidad de energía que es la que puede ser utilizada en otro tipo de proceso.

De forma general, la *figura 1* muestra una clasificación de las posibles fuentes de la biomasa.etc.

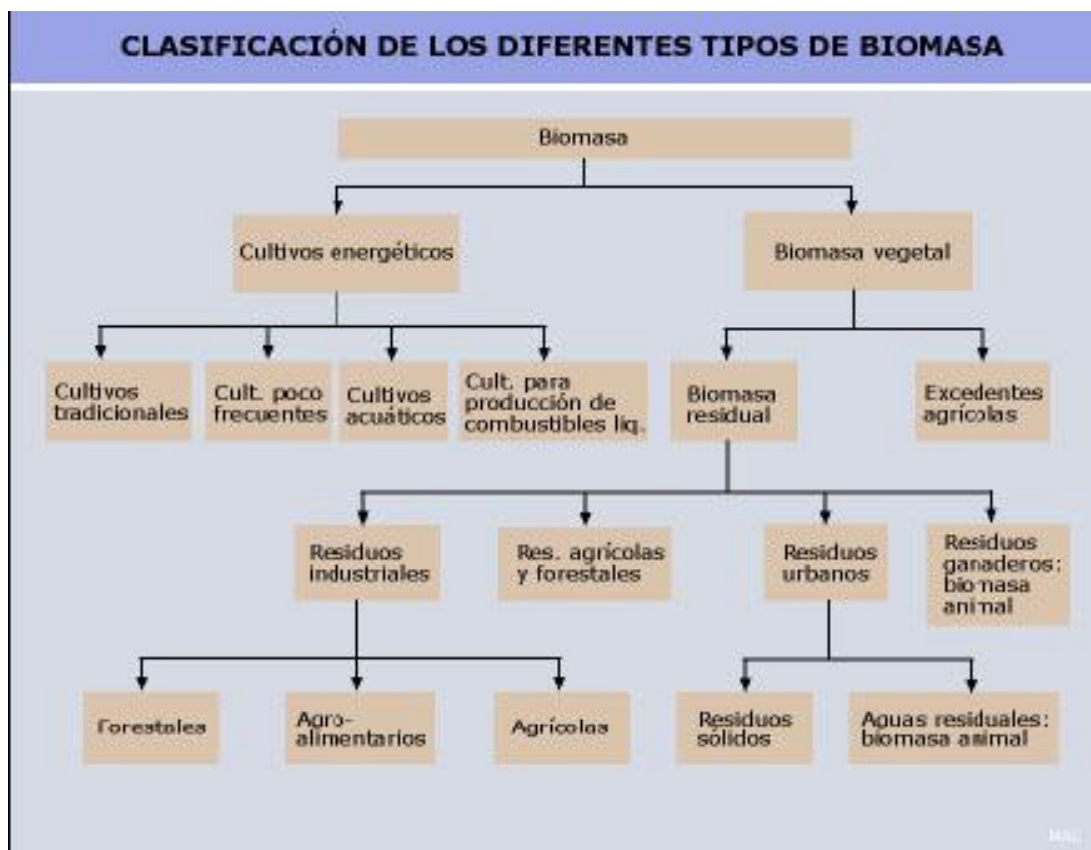


Figura 1. Clasificación de los diferentes tipos de biomasa [1].

Existen diversas formas de aprovechamiento de la biomasa, comúnmente denominadas procesos de conversión. El proceso que más se lleva a cabo de forma tradicional es la quema directa en plantas con ciclos de vapor. Por otra parte, se están empezando a introducir en el mercado sistemas más eficientes y avanzados orientados a hibridar los ciclos combinados de la gasificación de biomasa (IGCC: Integrated Gasification Combined Cycle), donde se aprovechan los gases de escape de las turbinas de gas para alimentar un generador y producir energía eléctrica. Esta última es la vía más eficiente de aprovechamiento de la biomasa y la que tiene un futuro más prometedor.

La composición que presenta la biomasa determina sus propiedades de aprovechamiento térmico. La *figura 2* muestra una clasificación general de los principales procesos de conversión.

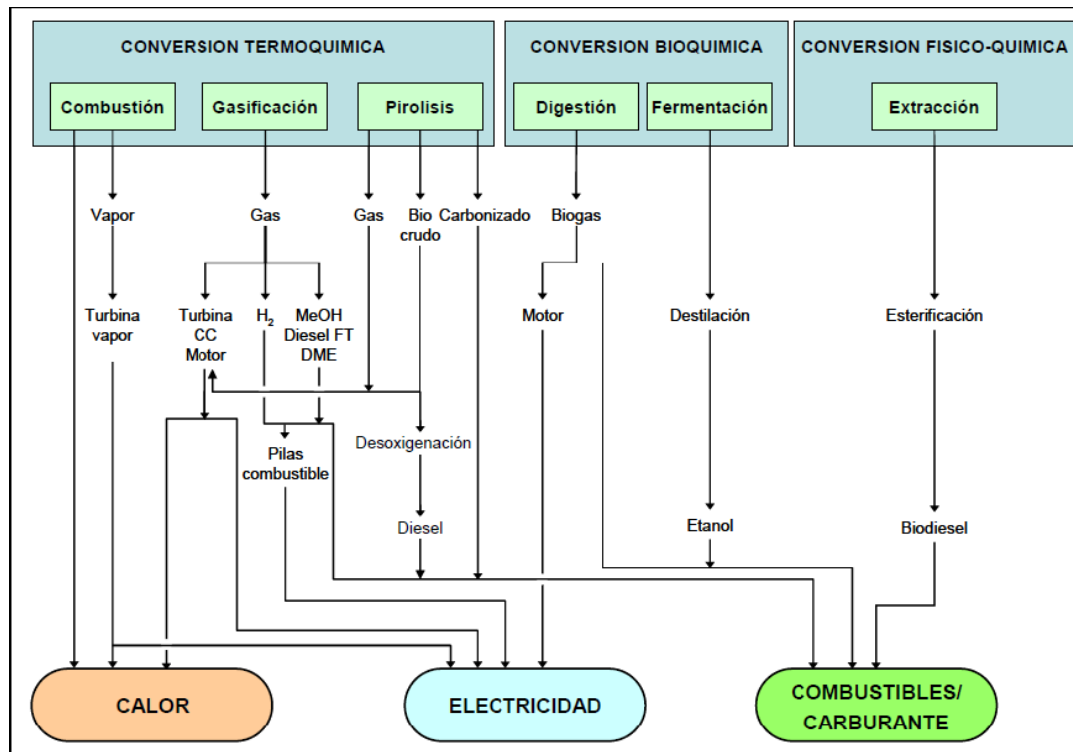


Figura 2. Procesos de conversión de la biomasa y aplicaciones [2].

2.2.1 Propiedades de la biomasa

1. Relación celulosa – lignina:

Principalmente, la biomasa lignocelulósica (utilizada para procesos de gasificación) contiene celulosa (polímero lineal de D-glucosa), hemicelulosa (polímero ramificado) y lignina (adhesivo resinoso que mantiene unidas a las células de la madera) teniendo una composición estándar $C_6H_{10}O_5$. La *figura 3* da una idea de la composición genérica de la biomasa lignocelulósica, formando parte de este grupo materiales como fibra de maíz, paja (de trigo, cebada), madera, pasto y papel de oficina.

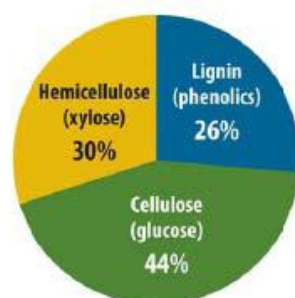


Figura 3. Composición genérica de la biomasa lignocelulósica. [3]

2. Humedad Relativa (H.R.):

El contenido de humedad de la biomasa es la relación de la masa de agua contenida por kilogramo de materia seca. Para la mayoría de los procesos de conversión energética es imprescindible que la biomasa tenga un contenido de humedad inferior al 30%.

Muchas veces, los residuos salen del proceso productivo con un contenido de humedad muy superior, que obliga a implementar operaciones de acondicionamiento, antes de ingresar al proceso de conversión de energía.

3. Poder Calorífico:

El contenido calórico por unidad de masa es el parámetro que determina la energía disponible en la biomasa. Su poder calórico está relacionado directamente con su contenido de humedad. Un elevado porcentaje de humedad reduce la eficiencia de la combustión debido a que una gran parte del calor liberado se usa para evaporar el agua y no se aprovecha en la reducción química del material.

Materia	Contenido de Humedad (%H₂O)	Poder calorífico Superior (MJ/kg)	Contenido FC (%)	Contenido VM (%)	Contenido de ceniza (%)	Metales alcalinos (%)
Abeto	6,5	21	17,2	82,0	0,8	—
Pino Danés	8,0	21,2	19,0	71,6	1,6	4,8
Sauce	60	20,0	—	—	1,6	15,8
Álamo	45	18,5	—	—	2,1	16
Paja de cereal	6	17,3	10,7	79,0	4,3	11,8
Miscanthus	11,5	18,5	15,9	66,8	2,8	—
Caña	45–50	19,4	—	—	3,5	4,4
Switchgrass	13–15	17,4	—	—	4,5	14
Carbón bituminoso	8–12	26–2	57	35	8	—
Madera	20	18,6	17	82	1	—
Paja de trigo	26	17,3	21	59	4	—
Paja de cebada	30	16,1	18	46	6	—
Lignitio	34	26,8	31	29	6	—

^a En base seca

Tabla 1. Propiedades de las distintas biomásas. [5]

4. Composición elemental

En la biomasa como en el resto de los combustibles, ya que todos provienen de un origen animal o vegetal, los principales átomos que lo forman son C, O, N, H y S en las proporciones que aparecen en la *tabla 2*.

Materia	%C	%H	%O	%N	%S	%Ceniza
Ciprés	55,0	6,5	38,1	—	—	0,4
Ceniza	49,7	6,9	43,0	—	—	0,3
Haya	51,6	6,3	41,4	—	—	—
Madera (media)	51,6	6,3	41,5	0	0,1	1
Miscanthus	48,1	5,4	42,2	0,5	<0,1	2,8
Paja de trigo	48,5	5,5	3,9	0,3	0,1	4
Paja de cebada	45,7	6,1	38,3	0,4	0,1	6
Paja de arroz	41,4	5	39,9	0,7	0,1	
Carbón bituminoso	73,1	5,5	8,7	1,4	1,7	9
Lignito	56,4	4,2	18,4	1,6 ^a	—	5

a Combinado N y S.

Tabla 2: Análisis de componentes para algunos tipos de biomasa (%) [5]

5. Porcentaje de cenizas:

El porcentaje de cenizas indica la cantidad de materia sólida no combustible por kilogramo de material. En los procesos que incluyen la combustión de la biomasa, es importante conocer el porcentaje de generación de ceniza y su composición, pues, en algunos casos, ésta puede ser utilizada; por ejemplo, la ceniza de la cascarilla de arroz es un excelente aditivo para la fabricación de filtros de carbón activo, ver *tabla 1*.

6. Densidad:

Se define como el peso por unidad de volumen del material. Combustibles con alta densidad aparente favorecen la relación de energía por unidad de volumen, requiriéndose menores tamaños de los equipos y aumentando los períodos entre cargas. Por otro lado, materiales con baja densidad aparente necesitan mayor volumen de almacenamiento y transporte, presentan problemas para su utilización, lo cual complican los procesos de conversión y eleva su coste.

Biomasa	Volumen de masa (m ³ /Tn, daf) ^a	Densidad (Tn/m ³ , daf) ^a
Madera		
Astillas de madera dura	4,4	0,23
Virutas de madera blanda	5,2 – 5,6	0,18 – 0,19
Granulas	1,6 – 1,8	0,56 – 0,63
Aserrín	6,2	0,12
Virutas de cepilladora	10,3	0,10
Paja		
Suelta	24,7 – 49,5	0,02 – 0,04
Picada	12,0 – 49,5	0,02 – 0,08
Embalada	4,9 – 9,0	0,11 – 0,20
Modulada	0,8 – 10,3	0,10 – 1,25
Molida	9,9 – 49,5	0,02 – 0,11
Cúbica	1,5 – 3,1	0,32 – 0,67
Granulada	1,4 – 1,8	0,56 – 0,71

^a **Seca y libre de cenizas.**

Tabla 3: Adaptación de la tabla relativa a “densidad de distintos tipos de biomasa” [5]

7. Tipos de biomasa:

Los recursos biomásicos se presentan en diferentes estados físicos que determinan la factibilidad técnica y económica de los procesos de conversión energética que pueden aplicarse a cada tipo en particular. Por ejemplo, los desechos forestales indican el uso de los procesos de combustión directa o procesos termo-químicos; los residuos animales indican el uso de procesos anaeróbicos (bioquímicos), etc. El estado físico de la biomasa puede clasificarse según el tipo de recurso, como se indica en la *tabla 4*.

Recursos de biomasa	Tipo de residuo	Características físicas
Residuos forestales	Restos de aserrío: corteza, aserrín, astillas Restos de ebanistería: aserrín trozos, astillas Restos de plantaciones: ramas, corteza, raíces	Polvo sólido, HR >50% Polvo sólido, HR 30-45% Sólido, HR >55%
Residuos agropecuarios	Cascara y pulpa de frutos vegetales. Cascara y polvo de granos secos (arroz, café) estiércol. Residuos de cosechas: Tallos, hojas, cascara, maleza, pastura.	Sólido, alto contenido en humedad Polvo, HR < 25% Sólido, alto contenido en humedad Sólido HR > 55%
Residuos industriales	Pulpa y cascara de frutos vegetales. Residuos de procesamiento de carnes Aguas de lavado y precocido de carnes y vegetales. Grasas y aceites vegetales	Sólido, Humedad moderada Sólido, alto contenido humedad Líquido Líquido, grasoso
Residuos urbanos	Aguas negras Desechos domésticos orgánicos (cascara de vegetales) Basura orgánica (madera)	Líquido Sólido, alto contenido en humedad Sólido, alto contenido en humedad

Tabla 4: Clasificación de la biomasa [6]

2.2.2 Ventajas e inconvenientes

La elección de la biomasa se justifica por estar considerada como un vector energético universal, ya que existe una amplia variedad de productos o aplicaciones y es de fácil almacenamiento.

En la *tabla 5* se muestran las ventajas e inconvenientes del uso de la biomasa, sirviendo para poder hacer una valoración del uso de esta fuente de energía.

Ventajas	Inconvenientes
<ul style="list-style-type: none"> ○ No contribuye al aumento del efecto invernadero, puesto que el CO₂ emitido en el aprovechamiento energético de la biomasa es el que se ha necesitado para el crecimiento de la materia vegetal. ○ No emite azufre ni hidrocarburos policíclicos de alto poder contaminante y proclive a producir lluvia ácida. ○ Uso de recurso renovable en corto período de tiempo. ○ Los productos obtenidos son biodegradables. ○ Puede formar parte de un proceso de reducción de Gases de Efecto Invernadero (GEI) si se emplea en procesos con combustibles fósiles (como aditivos o sustitutos). ○ Prevención de contaminación de suelos y malos olores mediante la eliminación de residuos. ○ Prevención de incendios mediante el aprovechamiento de residuos agrícolas. ○ Diversificación energética. ○ Prevención de la erosión del suelo mediante la implantación de cultivos energéticos. ○ Promoción de actividad agrícola y económica. 	<ul style="list-style-type: none"> ○ Baja densidad energética, lo que ocasiona elevados costes en la manipulación. ○ Peor disposición y abastecimiento. ○ Peor rendimiento comparado con los procesos que involucran combustibles fósiles. ○ Necesidad de procesos de transformación para su uso.

Tabla 5. Ventajas e inconvenientes de la utilización de la biomasa [7,8]

2.3 Fluidización

Fluidización es el proceso mediante el cual un lecho de partículas sólidas adquiere el comportamiento de un fluido al ser atravesado por una corriente de gas o líquido.

El comportamiento de un lecho se clasifica en función del caudal de fluido introducido y el diámetro de las partículas del lecho, mostrando un resumen de los procesos que se dan en la *figura 5*. Al introducir un caudal bajo de fluido, éste se filtra a través de los huecos del lecho, sin afectar significativamente el movimiento de las partículas. Este estado describe el comportamiento de un lecho fijo (*fig. 5a*). A medida que se aumenta el caudal de fluido, se consigue crecimiento en el movimiento y la vibración de las partículas del lecho, provocando una expansión en el lecho.

La mínima fluidización (*fig. 5b*) tiene lugar cuando el caudal del fluido que pasa a través del lecho contribuye a que las fuerzas de fricción entre el fluido y las partículas se igualen al peso de las partículas del lecho. Se consigue así anular la componente vertical de las fuerzas de compresión, igualando la pérdida de carga a través de cualquier sección del lecho con el peso del fluido y las partículas. Este fenómeno puede apreciarse en la *figura 4*.

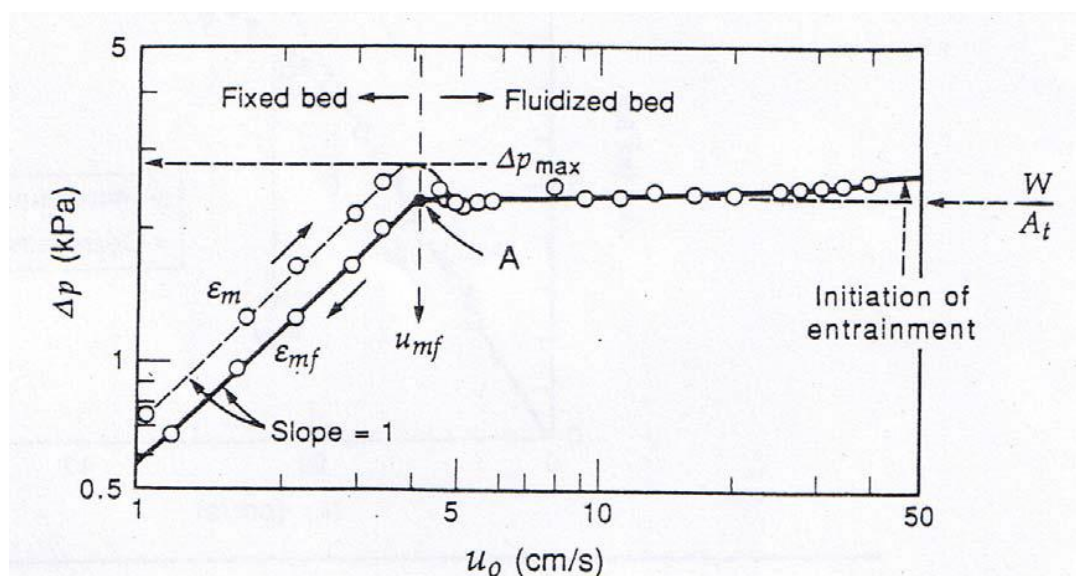


Figura 4. Influencia de la velocidad superficial del gas en la pérdida de carga. [4]

Si se sobrepasa la velocidad de mínima fluidización en sistemas gas-sólido, existirá un exceso de gas alimentado sobre la mínima fluidización, dando lugar a la formación de burbujas (*fig. 5d*). Se considera que el lecho está bajo condiciones de fluidización burbujeante. La utilidad de este fenómeno radica en que las burbujas provocan un aumento de la superficie de contacto y de reacción entre el aire y el lecho, favoreciendo así las reacciones químicas que tengan lugar en él. Si el caudal de gas sigue aumentando las burbujas crecerán de tamaño pudiendo llegar a ocupar toda la sección del reactor (Slugging) (*fig. 5e*), llegando a separarse parte del lecho del resto (*fig. 5f*).

A caudales mayores, existe una velocidad terminal a partir de la cual las partículas empiezan a ser arrastradas, provocando turbulencias en el movimiento del lecho (lecho fluidizado turbulento, *fig. 5g*). A una velocidad superior, las partículas del lecho se desplazan junto con el gas al exterior del reactor (transporte neumático con un lecho fluidizado en fase dispersa, *fig. 5h*).

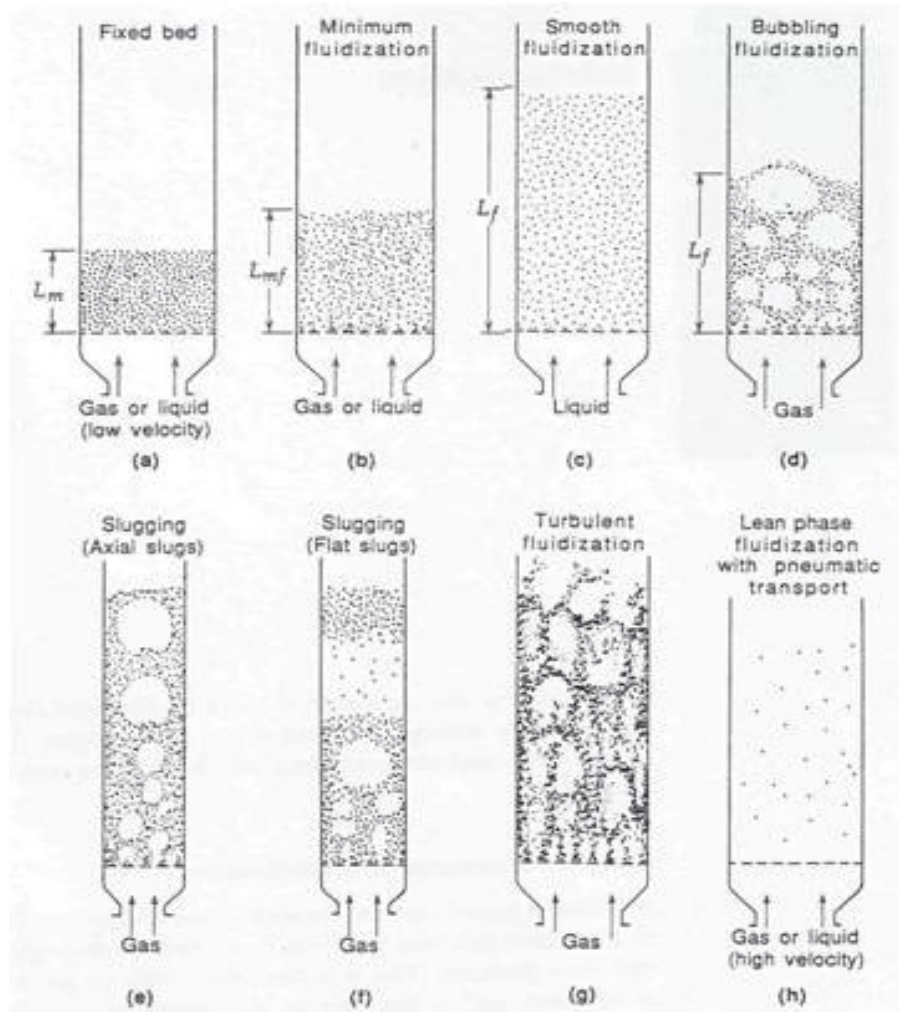


Figura 5. Etapas de un lecho fluidizado en un reactor [4]

2.3.1 Propiedades de los lechos fluidizados

Un lecho fluidizado y un líquido comparten características que hacen que sea ventajosa su utilización en determinados procesos. La *figura 6* muestra propiedades que ambos comparten:

1. Los objetos flotan en el lecho (*figura 6a*).
2. El lecho mantiene su nivel horizontal aunque se incline el recipiente que lo contiene (*figura 6b*).
3. Al practicar un orificio al recipiente las partículas salen en forma de chorro (*figura 6c*).
4. Por el principio de los vasos comunicantes, se igualan los niveles de dos lechos a diferentes alturas, por estar conectados físicamente (*figura 6d*).
5. Isotermidad: Mejor contacto gas-sólido, mejor transmisión de energía y materia entre el gas circulando como burbujas y el gas en fase de emulsión.

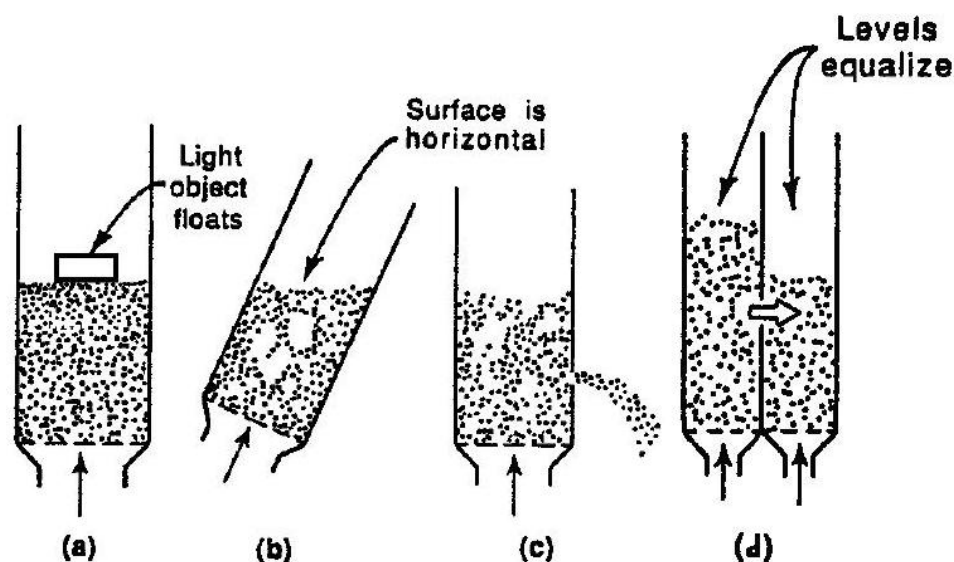


Figura 6. Características de los lechos fluidizados. [9]

Debido al comportamiento que presenta, la temperatura de reacción se puede controlar mediante el intercambio de calor, la propia alimentación al lecho y la eliminación de sólidos. La posibilidad de controlar la temperatura con facilidad permite que los sistemas de lecho fluidizado sean de utilidad a gran escala, encontrando unas condiciones homogéneas de temperatura.

Como se ha comentado en el anterior apartado, los distintos regímenes de fluidización vienen definidos principalmente por la velocidad del gas inyectado en el distribuidor. Para que se alcance un estado de fluidización burbujeante, se requiere superar una velocidad de mínima fluidización ($u_0 > u_{mf}$) según Kunii [4]; mientras que Yang [16] limita superiormente la velocidad del gas, estableciendo una velocidad mínima a la que empieza a aparecer slugging tal que $D_B < 0,66D$; esta condición, traducida a velocidades y aplicando la teoría hidrodinámica de Wen y Mori[19], supone $u_0 < 6u_{mf}$.

2.4 Gasificación

La gasificación en su sentido más amplio, es la conversión de un combustible sólido o líquido en un combustible gaseoso, estando (o no) en contacto con un medio gasificante. A diferencia del proceso de combustión, en la gasificación tiene lugar una oxidación parcial del combustible que produce un gas de síntesis (syngas) formado por H_2 , CO , CO_2 , CH_4 y H_2O y residuos (en forma de alquitrán, cenizas, partículas sólidas,...) en diferentes proporciones, pudiendo ser el agente gasificante oxígeno puro, aire y/o vapor de agua. La figura 7 muestra aplicaciones comunes y energía obtenida de la gasificación de biomasa en función del agente gasificante utilizado. El producto que tiene menor

energía aprovechable se obtiene gasificando con aire ($<6 \text{ MJ/m}^3$), y el de mayor energía, utilizando H_2 ($>30 \text{ MJ/m}^3$).

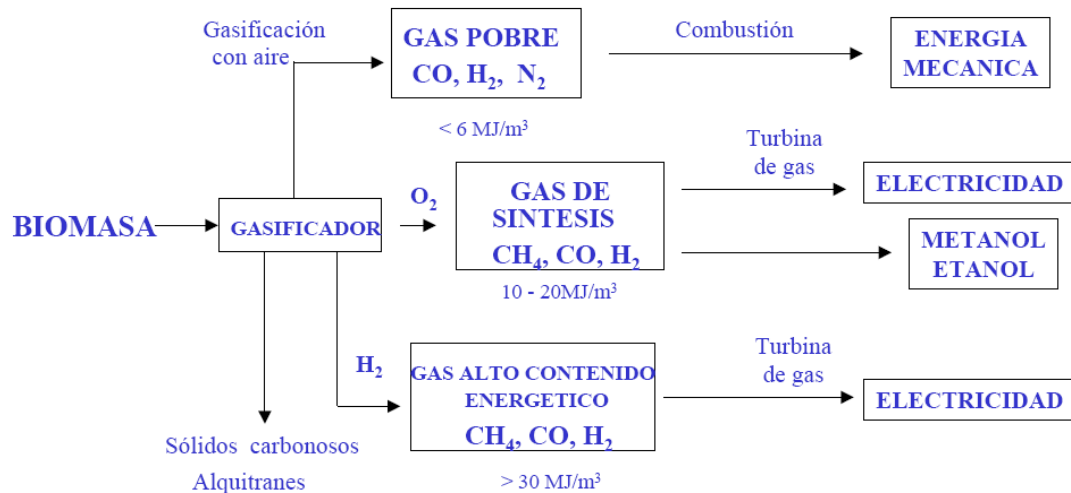


Figura 7. Gasificación de biomasa en función del agente gasificante empleado. [10]

2.4.1 Etapas de la gasificación

El proceso de gasificación se puede describir en tiene 3 etapas [4]. Ya hemos comentado que la gasificación es la conversión de un combustible sólido o líquido en un combustible gaseoso. Ocurren tres etapas simultáneamente.

1. Secado
2. Pirolisis
3. Gasificación (Oxidación + Reducción)

Secado

Cuando la biomasa de alimentación entra en el gasificador y se eleva la temperatura, se produce un proceso de evaporación física, liberando agua hasta los 200°C . A medida que la temperatura va aumentando, se volatilizan los compuestos de bajo peso molecular. Para poder desarrollar un modelo de simulación, algunos autores [16] suponen la volatilización a la entrada del reactor, obteniendo pequeñas diferencias, asumibles, en los resultados con respecto a considerar la cinética de volatilización a lo largo del lecho.

Pirólisis

Es la primera etapa de la degradación de la biomasa. En ausencia de O_2 , la estructura molecular de la biomasa se descompone generando gases de síntesis, char (residuo sólido carbonoso) y compuestos orgánicos condensables (alquitranes ó “tars”). La evolución de esta etapa está influenciada por el tamaño de partícula del lecho y su naturaleza, las condiciones de operación (T, P, tiempo de calentamiento y tiempo de residencia).

Gasificación (Oxidación + Reducción)

Esta etapa incluye reacciones endotérmicas que pueden darse gracias al calor producido por las reacciones de combustión existentes (exotérmicas). Incluye las reacciones de oxidación y reducción [4]. Algunos autores tienen en cuenta la oxidación por separado de la reducción. En la etapa de reducción se tienen en cuenta las reacciones Water-gas, Shift, Boudouard y Methanation [11], aunque cada caso dependerá de la cinética tenida en cuenta. El *capítulo 3* incluye las reacciones elegidas para la simulación de cada uno de los modelos a desarrollar.

La siguiente *figura 8* muestra el proceso completo, aplicable a la gasificación de carbón y biomasa. Se muestra un adelanto de las reacciones que se comentarán posteriormente, pudiendo observar cómo el char (parte sólida de la biomasa que reacciona con los componentes gaseosos, para formar gas de síntesis) se transforma mediante reacciones diferentes (heterogéneas) a las del resto de componentes generados en una primera etapa (homogéneas).

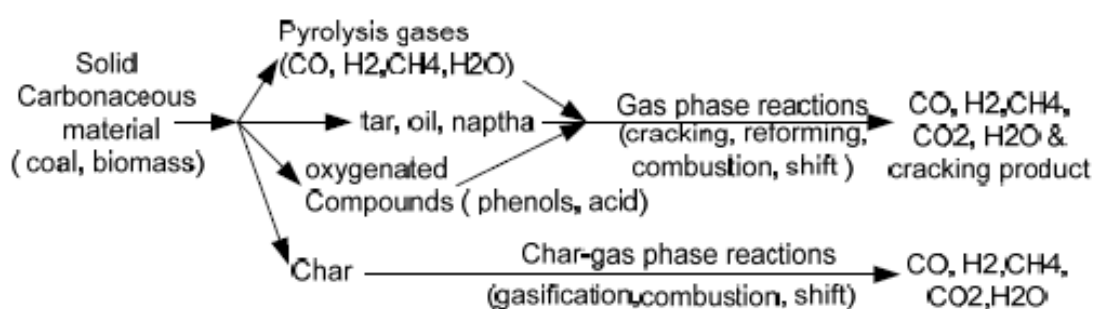


Figura 8. Subproductos de gasificación de biomasa. [12]

2.4.2 Tipos de gasificadores

Gasificadores de Lecho fijo

Tienen una zona de reacción estacionaria típicamente soportada por una rejilla y se alimentan por la parte superior del reactor. Son los más sencillos de diseñar y operar, además de los más adecuados para aplicaciones a pequeña y mediana escala con requerimientos térmicos de baja potencia. A grandes escalas, los gasificadores de lecho fijo pueden encontrar problemas con la alimentación de biomasa. Esto conlleva un flujo irregular de gas, por lo que conseguir temperaturas uniformes a lo largo del gasificador puede ser difícil debido a la ausencia de mezclado en la zona de reacción.

La mayoría de los gasificadores de lecho fijo son soplados por aire y producen gases de baja energía, aunque los diseños soplados por oxígeno han sido probados como más eficientes. Pueden ser diseñados en configuración updraft, downdraft o crossdraft.

Lecho fijo: Downdraft

Con gasificadores de lecho fijo downdraft, el agente gasificante (aire u oxígeno) desciende a través del gasificador, mediante un flujo en contracorriente. La gasificación ocurre cerca en la zona inferior del gasificador, en una zona de reacción caliente poco profunda que consta de una capa de carbonilla. La siguiente figura muestra un gasificador típico de lecho fijo en configuración downdraft. La oxidación de la biomasa genera calor para mantener el proceso de gasificación.

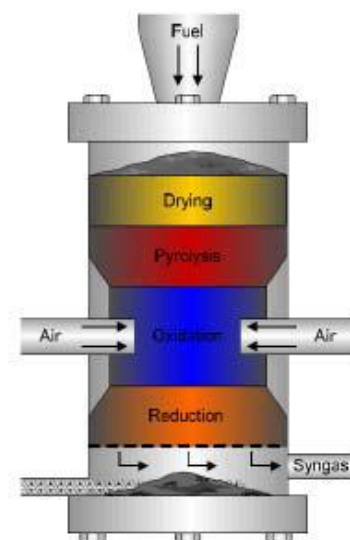


Figura 9. Gasificador de lecho fijo "downdraft". [13]

La mayoría del alquitrán en el syngas es destruido por craqueo térmico mientras pasa a través de la zona de reacción. Los niveles de partículas en el syngas son típicamente bajos debido a la ausencia de turbulencia en el gasificador, pero el gas puede contener componentes alcali mientras sale de la zona caliente del reactor. El principal inconveniente de los gasificadores downdraft es el alto contenido en cenizas arrastradas junto con el gas producido. Este tipo de reactores requieren combustibles con un contenido en humedad bajo ($< 25\%$).

Lecho fijo: Updraft

El agente gasificante asciende a través de la zona caliente del reactor, cerca de la parte baja del gasificador, en dirección contracorriente al flujo de material sólido como muestra la siguiente figura. Reacciones exotérmicas entre aire/oxígeno y el char, teniendo lugar en el lecho conducen el proceso de gasificación.

El calor en el gas sin tratar es transferido a la biomasa de alimentación, mientras los gases calientes ascienden, y la biomasa desciende a través del gasificador sufriendo secado, pirólisis y gasificación (reducción + oxidación) finalmente. El gas resultante sale a baja temperatura. Las concentraciones de alquitrán en el gas resultante son altas (principal desventaja) ya que los vapores formados en las reacciones de pirólisis son arrastrados hacia arriba a través del reactor con el gas resultante. Los niveles de partículas en el gas resultante a tratar son bajos a causa de las condiciones de no turbulencia. La ceniza es

arrastrada junto con los sólidos en la dirección opuesta a la del flujo de gas y es retirada de la parte inferior del gasificador. Con este tipo de gasificador se consigue un buen intercambio de calor, además de admitir combustible con alta humedad, puesto que en este caso pasa por una zona de secado.

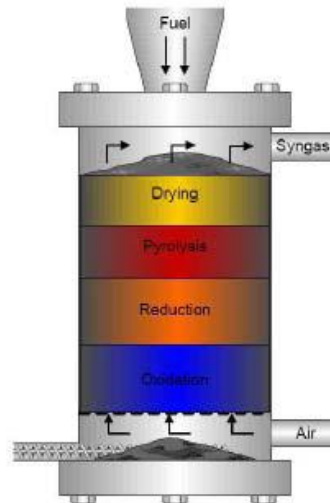


Figura 10. Gasificador de lecho fijo "updraft". [13]

Lecho fijo: Crossdraft

En este caso, el agente oxidante se introduce por un lateral del reactor, saliendo el gas de síntesis por el lado diametralmente opuesto. Las distintas etapas de gasificación ocurren concéntricas a la zona de inyección del agente oxidante, característica que permite operar con reactores a pequeñas escalas. La principal desventaja es el alto contenido en alquitrán obtenido.

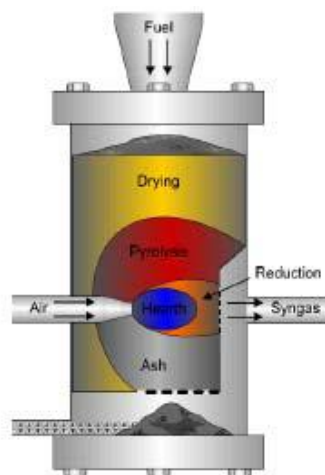


Figura 11. Gasificador de lecho fijo "crossdraft". [13]

Gasificadores de Lecho fluido

Una de las ventajas más importantes de la gasificación en lecho fluidizado es la uniformidad conseguida en la distribución de temperatura en el lecho, puesto que el movimiento de las partículas favorece el mezclado, favoreciendo el contacto gas-sólido.

El gas utilizado para fluidizar el material del lecho puede ser aire, oxígeno, vapor, gas resultante de un reciclado, o una combinación. Los gasificadores de lecho fluidizado pueden ser dimensionados para instalaciones de mediana y gran escala y son los más adecuados para situaciones donde hay una relativa demanda constante del gas resultante. Esencialmente, todas las instalaciones gasificadoras de grandes dimensiones construidas y probadas en la última década usan diseños de lecho fluidizado. El gas resultante existente del gasificador típicamente tiene altos niveles de partículas como resultado de la turbulencia en el reactor. Las partículas consisten en cenizas originadas por la biomasa y partículas finas que escapan del lecho. Dentro de esta clasificación, se pueden encontrar gasificadores de lecho fluidizado burbujeante, de lecho fluidizado circulante y lecho arrastrado.

Gasificadores de lecho fluidizado burbujeante:

Al hacer atravesar una corriente de gas a través del lecho de partículas, este al principio no se verá afectado. Según se va introduciendo el gas a más velocidad, el lecho comenzará a moverse hasta que las partículas queden suspendidas en el gas, adquiriendo el comportamiento de un líquido, en lo que se denomina lecho móvil. En el seno de dicho lecho llegará un momento en el que se formen burbujas de mayor o menor tamaño en función de la velocidad del gas. Las burbujas tendrán tamaño, forma, velocidad de ascenso y formación muy similares a las burbujas que se producen en líquidos verdaderos. El mezclado que se produce en los lechos fluidizados da como resultado una temperatura uniforme en todo lecho siendo este hecho muy importante por dos motivos, en primer lugar conlleva un control sencillo y seguro de operaciones isotérmicas y en segundo lugar los lechos con partículas bien mezclados resisten muy bien ante rápidas variaciones de temperatura por lo que responden lentamente a los cambios bruscos en las condiciones de operación y ofrece un gran margen de seguridad, evitando pérdidas de temperatura en reacciones altamente exotérmicas. Estructuralmente estos gasificadores consisten en una vasija con una placa distribuidora en la parte más baja a través de la cual se introduce el aire. Sobre la rejilla se mueve el lecho de un material con tamaño de grano muy fino donde la biomasa es introducida. La temperatura del lecho entre los 750-900°C se controla mediante la relación entre la cantidad de aire y la de biomasa. La biomasa es pirolizada en el lecho caliente para dar lugar a char, gas de síntesis y alquitranes (tar) o compuestos gaseosos de alto peso molecular que serán craqueados rotos en el lecho caliente.

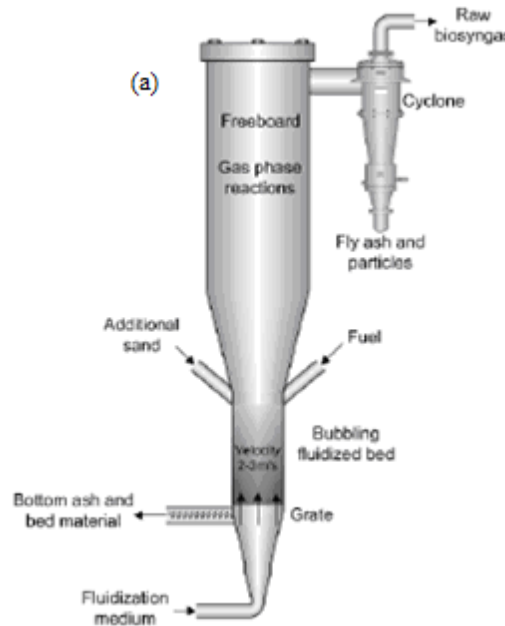


Figura 12. Gasificador de lecho fluidizado burbujeante [13]

Gasificadores de lecho fluidizado circulante:

La diferencia que suponen los gasificadores de lecho fluidizado circulante es la existencia de una tubería de retorno al reactor; como consecuencia de la recirculación, se obtienen gases de síntesis con un poder calorífico 3 veces superior al de los gasificadores convencionales (4-6 MJ/Nm³).

Estos gasificadores pueden ser utilizados a altas presiones siendo muy útiles en aplicaciones que necesitan el gas a alta presión como turbinas de gas donde éste debe ser inyectado a presiones entre 10-25 bares.

Gasificadores de lecho arrastrado:

En este tipo de gasificadores los sólidos son arrastrados en el flujo de gas, fluyendo en paralelo a altas velocidades. Para la obtención de buenas conversiones, se requieren temperaturas de reacción de 1200 °C, puesto que el tiempo de residencia de los sólidos es muy corto (del orden de segundos). Al operar con temperaturas tan altas, se suele operar en modo slagging (con cenizas fundidas) a elevadas presiones.

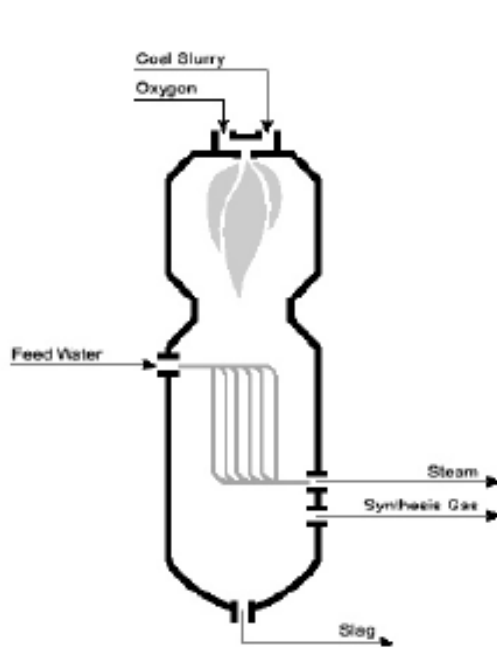


Figura 13. Gasificador de lecho arrastrado [13]

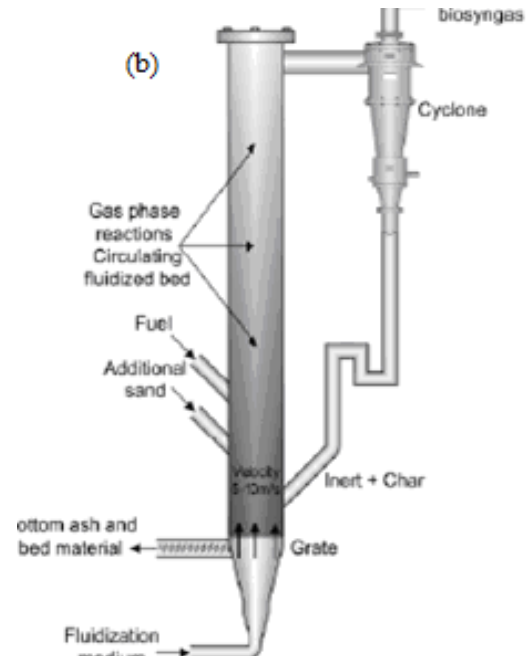


Figura 14. Gasificador de lecho fluidizado circulante [13]

3. MODELOS DE SIMULACION

Visto el proceso de fluidización y gasificación en el *capítulo 2* se procederá a desarrollar dos aplicaciones para la simulación de un gasificador de lecho fluidizado. Se desarrollaran dos aplicaciones según dos modelos distintos, un modelo de equilibrio y un modelo cinético. Se realizará un estudio comparativo de ambos modelos variando diversos parámetros relevantes en la conversión de la biomasa, teniendo como objetivo la obtención de conclusiones que nos permitan mejorar la herramienta de simulación del proceso.

Para desarrollar una aplicación basado en un modelo de equilibrio se utilizará el Método de relajación [14]. Se asume en este método que cada reacción se lleva a cabo en un reactor separado y reacciona al equilibrio. Cada composición de equilibrio de cada reactor entra en el siguiente reactor que vuelve a alcanzar el equilibrio. Así pues la composición de equilibrio para todas las reacciones se encuentra iterativamente. El procedimiento puede ser detenido cuando la cantidad molar de cada especie permanece invariable de una simulación en cascada.

Para desarrollar una aplicación de simulación de un gasificador de biomasa en lecho fluidizado burbujeante que tenga en cuenta la cinética, se hará una representación completa de un sistema de todas las reacciones químicas importantes que ocurren en el generador de gas, y se desarrollará de acuerdo a la teoría de las dos fases de fluidización. Una fase burbuja, y una fase de emulsión que contiene todas las partículas y una fracción del gas, es continua y se dice a permanecer en condiciones de fluidización incipiente.

El desarrollo de una aplicación de simulación para un gasificador tiene por objetivo:

- Crear una herramienta de simulación que reproduzca las condiciones del proceso de gasificación sin necesidad de experimentar, lo que conlleva un ahorro de coste económico y de experimentación.
- Cálculo de la composición de los gases a la salida del reactor y demás variables típicas de estos sistemas: poder calorífico inferior, así como la conversión de carbón obtenida la cual nos da una idea de la eficiencia del proceso.
- La optimización del rendimiento del sistema en forma de calor de combustión de los gases obtenidos en la gasificación, o bien, de gas de síntesis producido por unidad de combustible introducido en el gasificador.

- Ver la influencia de cada reacción dentro del conjunto de reacciones que tienen lugar en el gasificador, evaluada mediante los órdenes de magnitud de sus velocidades de reacción.

3.1 Geometría y Parámetros del reactor

Las principales variables para evaluar cómo influye la variación de su valor en la composición del gas de síntesis resultante, y a la conversión de char obtenida para compararlo con datos experimentales son:

- Temperatura de reacción: Es la temperatura que consideramos a la que de producen las reacciones de gasificación dentro del gasificador. La consideramos constante durante cada simulación de ambos modelos.
- Estado de fluidización (x): Se define como el cociente entre la velocidad superficial del gas " u_0 " y la velocidad de mínima fluidización. $x = \frac{u_0}{u_{mf}}$. El estado de fluidización define el régimen de fluidización como hemos visto en el capítulo 2.3.
- Equivalence Ratio (ER): Es un parámetro que cuantifica la proporción de aire y biomasa que entra al gasificador, es decir, el grado de combustión parcial que se esta aplicando al combustible introducido.

$$ER = \frac{\frac{f_{aire}}{f_{biomasa}}|_{real}}{\frac{f_{aire}}{f_{biomasa}}|_{estequiometrico}}$$

- Relación de esbeltez. Se define como la relación altura/diámetro (L/D) existente en el lecho del reactor.

Una vez definidos los parámetros de funcionamiento se definen los parámetros característicos del lecho fluidizado (diámetro de partícula, esfericidad, porosidad y densidad del sólido) y la geometría del reactor (diámetro y altura del reactor). Se toma la velocidad mínima de fluidización de la ecuación de Ergun y Ornig [28].

La *tabla 6* muestra un resumen de los parámetros que tienen más relevancia en el proceso de fluidización.

Propiedades de las partículas del lecho	Diámetro (d_p) .Anexo 1 Esfericidad (ϕ_s) . Anexo 2 Porosidad del lecho (ε_{mf}) Clasificación de los sólidos (densidad). Anexo3
Variables de operación	Estado de fluidización (u_0/u_{mf}) Temperatura Dosado (ER)
Parámetros geométricos	Relación de esbeltez (L/D) Diámetro del reactor (D)

Tabla 6. Parámetros fundamentales de la fluidización.

3.2 Hipótesis generales

Para el desarrollo de ambas aplicaciones basadas en distintos modelos se tomarán unos supuestos iniciales. El gasificador se alimentará de biomasa y aire según la proporción que indiquemos (ER) de forma continua. Obtendremos así a la salida del reactor un combustible gaseoso rico en H_2 , CO y una pequeña cantidad de CH_4 . El rango de operación del gasificador estará entre $750^\circ C - 900^\circ C$ a una presión de trabajo de 1 atm.

Parámetros de sensibilidad	Rango de variación
Temperatura ($^\circ C$)	750-900
Presión (atm)	1
ER	$0,25 \leq ER \leq 0,35$
Estado de Fluidización	$1,2 \leq u_0/u_{mf} \leq 6$

Tabla 7. Parámetros de sensibilidad [13]

A continuación se expondrán las hipótesis generales de partida que permitirá desarrollar ambas aplicaciones:

- Se considera un sistema en estado estacionario e isotermo debido a la homogeneidad que otorga en el lecho fluidizado.
- Se tiene en cuenta unos parámetros de entrada, unas reacciones consideradas que ocurren dentro del lecho fluidizado, con ello se obtienen unos parámetros de salida, que son la proporción de cada especie en el gas final de síntesis.
- La volatilización de la biomasa se supone instantánea, incluyéndola a la entrada del lecho, estando formados principalmente por H_2 , CO , CO_2 , H_2O , CH_4 [15]. Estas especies se distribuyen uniformemente dentro del gas en fase emulsión. Las correlaciones empleadas para el cálculo de las fracciones másicas son:

$$X_{H_2} = 0.157 - 0.868X_{mv} + 1.388(X_{mv})^2$$

$$X_{CO} = 0.428 - 2,653X_{mv} + 4,845(X_{mv})^2$$

$$X_{CO_2} = 0.135 - 0.9X_{mv} + 1.906(X_{mv})^2$$

$$X_{HO_2} = 0.409 - 2.389X_{mv} + 4.554(X_{mv})^2$$

$$X_{CH_4} = 0.201 - 0.469X_{mv} + 0.241(X_{mv})^2$$

Donde X_{mv} es la fracción másica de materia volátil de la biomasa en base seca y libre de cenizas. Esta limitada entre $0.05 \leq X_{mv} \leq 0.51$.

- Se considera el conjunto de las siguientes reacciones como las que se producen dentro de un gasificador. En las columnas “modelo de equilibrio” y “modelo cinético” se marca en cada casilla las reacciones que se tienen en cuenta para cada modelo:

Designación	Reacción	Nombre	Modelo equilibrio	Modelo cinético
R1	$C + H_2O = CO + H_2$	Water-gas	X	X
R2	$C + 2H_2 = CH_4$	Hydrogasification	X	X
R3	$C + 1/2H_2O + 1/2H_2 = 1/2CO + 1/2CH_4$			X
R4	$H_2 + 1/2O_2 = H_2O$		X	X
R5	$CO + 1/2O_2 = CO_2$		X	X
R6	$CH_4 + 2O_2 = CO_2 + 2H_2O$		X	X
R7	$CO + H_2O = H_2 + CO_2$	Water gas - shift	X	X
R8	$C + fO_2 = 2(1-f)CO + (2f-1)CO_2$			X
R9	$CH_4 + H_2O = CO + 3H_2$	Steam reforming	X	
R10	$C + CO_2 = 2CO$	Boudouard	X	

Tabla 8. Reacciones consideradas [15]

3.3 Modelo de equilibrio

En este apartado nos centraremos en el desarrollo de la aplicación basado en el modelo de equilibrio. Se basa en el equilibrio termodinámico de las especies reaccionantes presentes en el sistema. Para desarrollar dicho modelo no hace falta conocer los mecanismos cinéticos de conversión de char durante la gasificación de la biomasa.

Para desarrollar el modelo de equilibrio utilizaremos el llamado método de relajación [14]. En este método se asume que cada reacción tiene lugar en serie, en un reactor separado, y reaccionan hasta alcanzar el equilibrio. Esta composición de equilibrio entra en el siguiente reactor (“reacción”) que vuelve a alcanzar el equilibrio. Al abandonar el último reactor la composición entra de nuevo el primer reactor y la cadena de cálculo de equilibrio se inicia una segunda vez. Es un proceso de cálculo iterativo hasta que la diferencia entre la composición usada como dato en el primer reactor y la calculada en el último sean menor que una tolerancia definida. Así pues la composición de equilibrio para todas las reacciones se encuentra iterativamente.

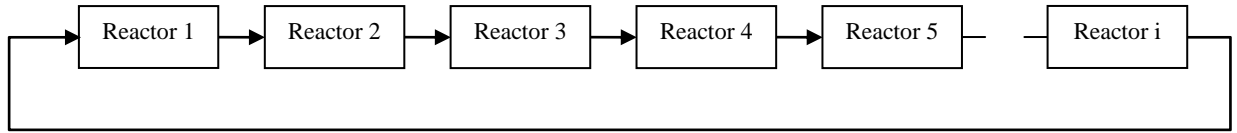
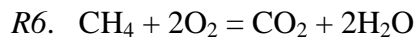
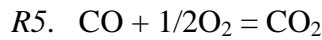
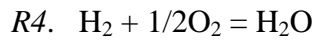


Figura 15. Esquema de la simulación del método de Relajación

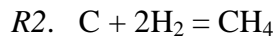
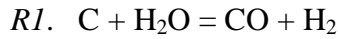
3.3.1 Reacciones consideradas en el modelo de equilibrio

Ayudados del valor de la constante de equilibrio “ K_{eq} ” podemos definir las reacciones consideradas para el desarrollo de la aplicación basado en el modelo de equilibrio.

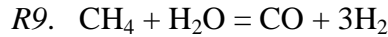
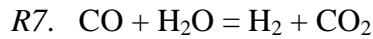
Reacciones de combustión ($K_{eq} \gg 100$)



Reacciones de gasificación del char.



Reacciones cercana al equilibrio



3.3.2 Termodinámica del sistema

En este apartado se calcula las entalpías y entropías de cada especie. Posteriormente se calculan las entalpías y entropías de cada reacción para poder calcular la Energía libre de Gibbs de cada reacción y con ella la K_{eq} , con la que determinaremos si la reacción es directa, inversa o cercana al equilibrio termodinámico.

Las entalpías y entropías de cada especie en función de la temperatura vienen dadas por las correlaciones JANAF [29].

$$Cp_i = R \cdot (a1_i + a2_i T + a3_i T^2 + a4_i T^3 + a5_i T^4 + a6_i T^5) \quad (16)$$

$$H_i = R \cdot \left(a1_i \cdot T + a2_i \cdot T^2 \cdot \frac{1}{2} + a3_i \cdot T^3 \cdot \frac{1}{3} + a4_i \cdot T^4 \cdot \frac{1}{4} + a5_i \cdot T^5 \cdot \frac{1}{5} + a6_i \cdot T^6 \cdot \frac{1}{6} \right) \quad (17)$$

$$S_i = R \cdot \left(a1_i \cdot \log T + a2_i \cdot T + a3_i \cdot T^2 \cdot \frac{1}{2} + a4_i \cdot T^3 \cdot \frac{1}{3} + a5_i \cdot T^4 \cdot \frac{1}{4} + a6_i \cdot T^5 \cdot \frac{1}{5} \right) \quad (18)$$

Para calcular las entalpías de cada especie se utiliza la Ley de Kirchhoff. Se calcula la diferencia de entalpías entre la temperatura ambiente y la temperatura de operación, para

después sumar las entalpías de formación de cada especie. De la misma manera, se hará para calcular las entropías de cada especie.

$$\Delta H_i = [H_i(Top) - H_i(Tref)] + Hf_i \quad (19)$$

$$\Delta S_i = [S_i(Top) - S_i(Tref)] + Sf_i \quad (20)$$

Las entalpías y entropías de cada reacción vienen dadas por las ecuaciones 21 y 22. Los reactantes van con signo negativo y los productos con signo positivo.

$$\Delta H_r = \int_{Tref}^{Top} \Delta Cp \cdot dT \quad (21)$$

$$\Delta S_r = \int_{Tref}^{Top} \frac{\Delta Cp}{T} \cdot dT \quad (22)$$

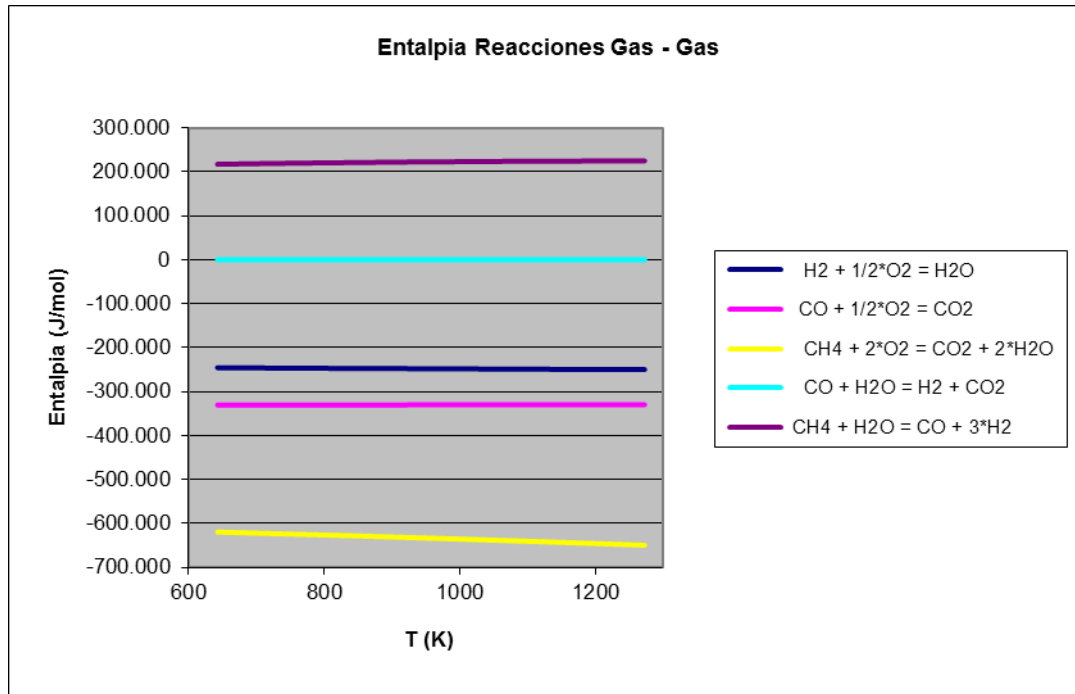


Figura 16. Entalpía de las reacciones gas-gas con la temperatura

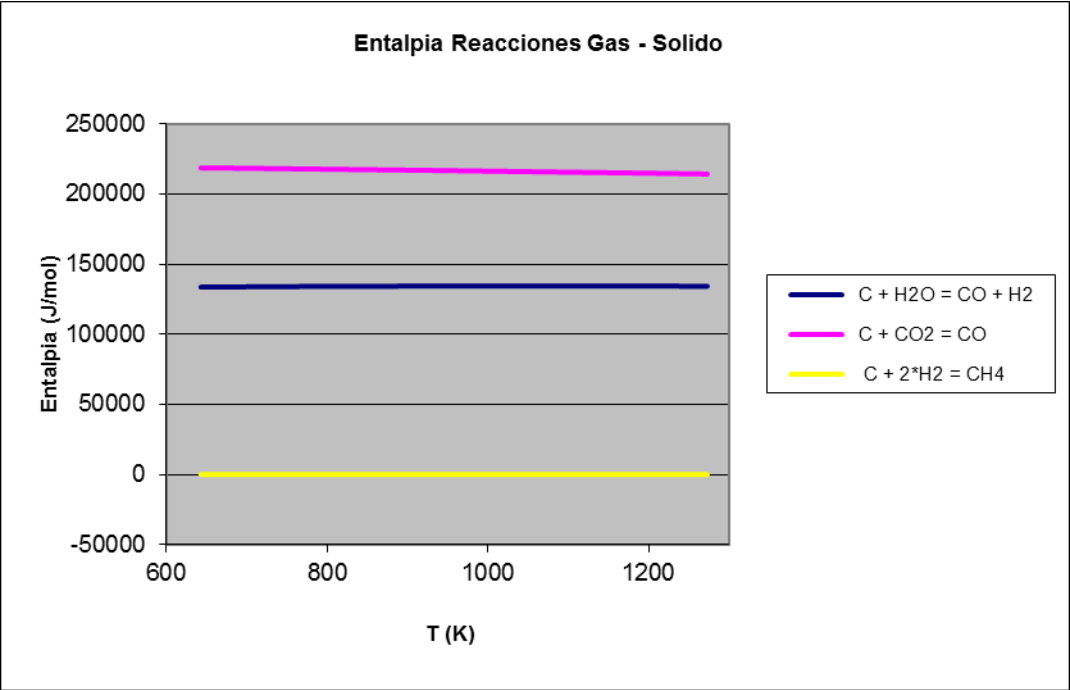


Figura 17. Entalpía de las reacciones gas-sólido con la temperatura

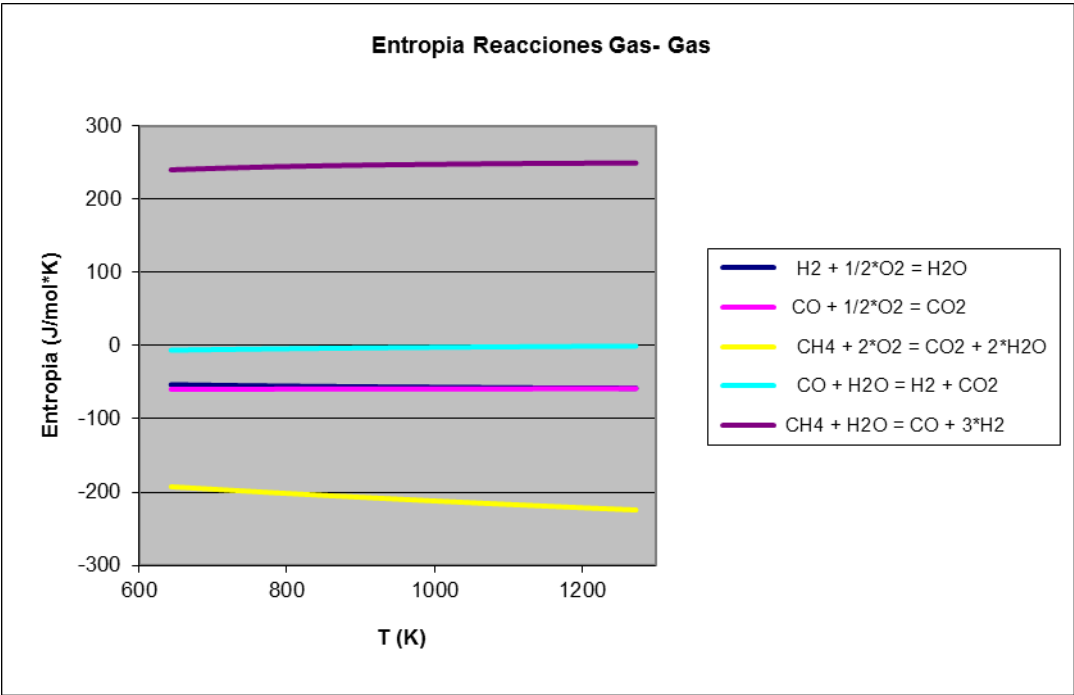


Figura 18. Entropía de las reacciones gas – gas con la temperatura

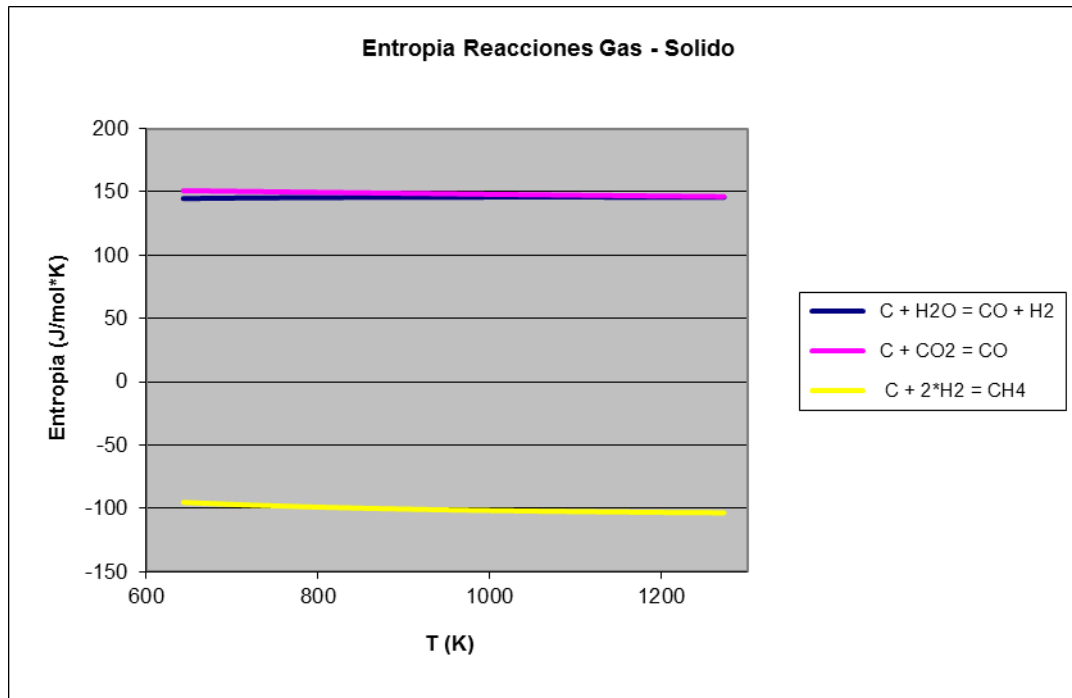


Figura 19. Entropía de las reacciones Gas-Sólido con la temperatura

Una vez calculadas las variaciones de entalpías y entropías de cada reacción podemos obtener la constante de equilibrio (K_{eq}) de cada reacción. La K_{eq} da una idea de la manera en que se produce la reacción.

Definimos La contante de equilibrio [14] como:

$$K_{eq} = \exp\left(\frac{-\Delta G}{T \cdot R}\right) \quad (23)$$

Donde la variación de la energía libre de Gibbs (ΔG) se define como:

$$\Delta G_r = \Delta H_r - T \cdot \Delta S_r \quad (24)$$

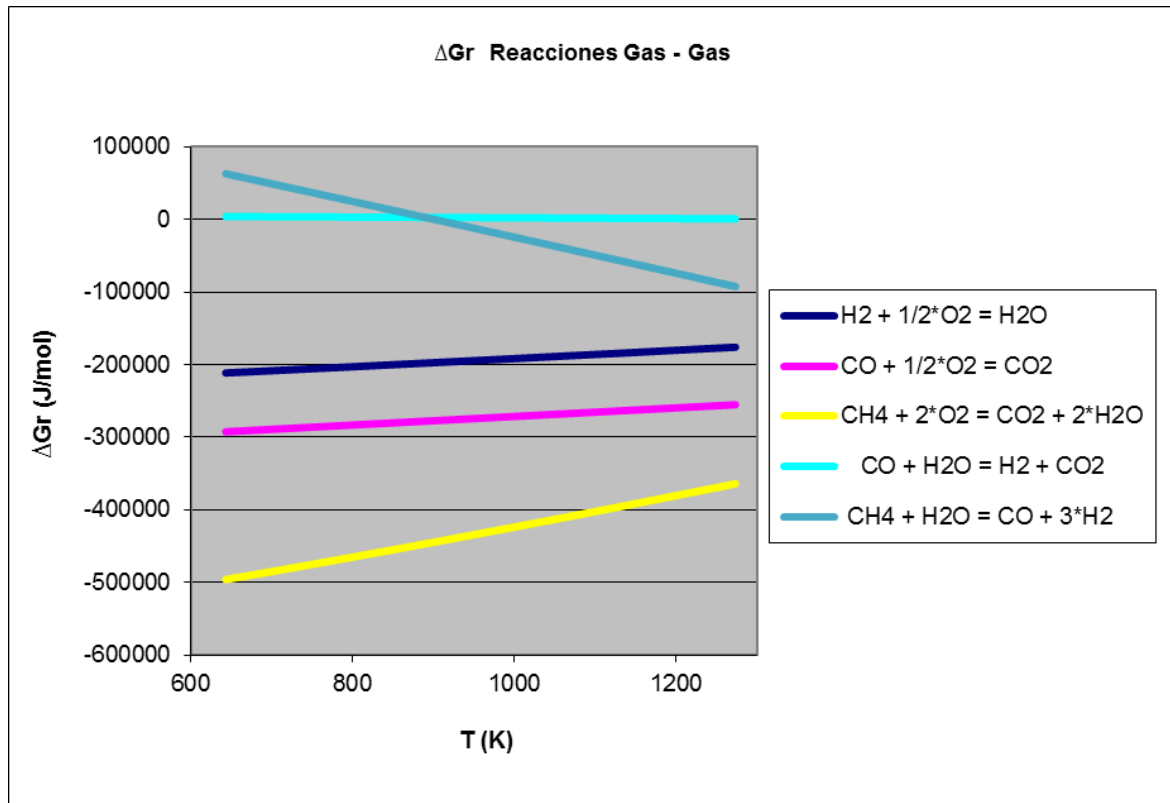


Figura 20. Variación de la energía libre de Gibbs de las reacciones Gas-Gas con la temperatura

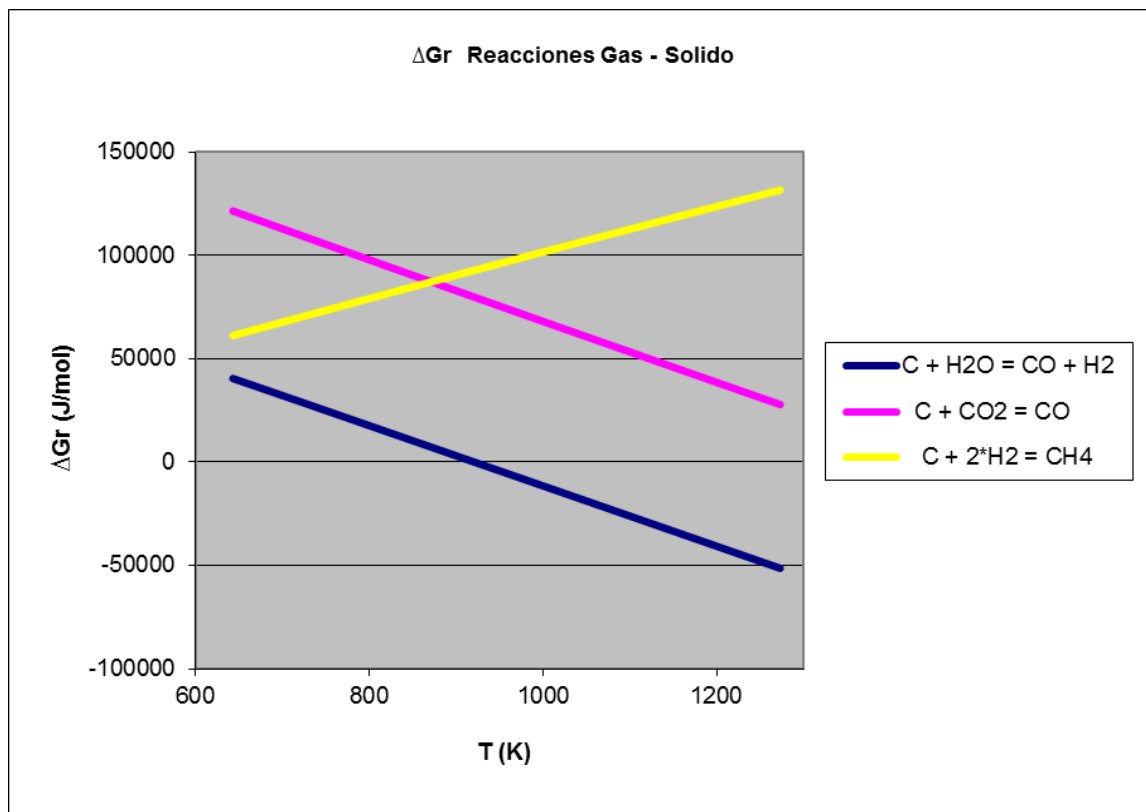
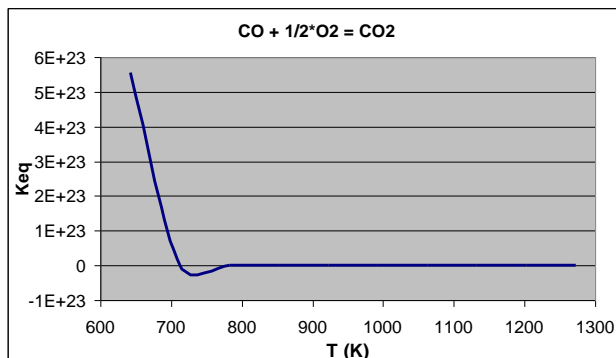
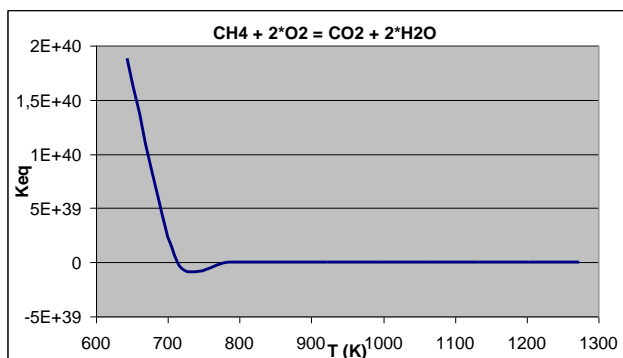


Figura 21. Variación de la energía libre de Gibbs de las reacciones gas-sólido con la temperatura

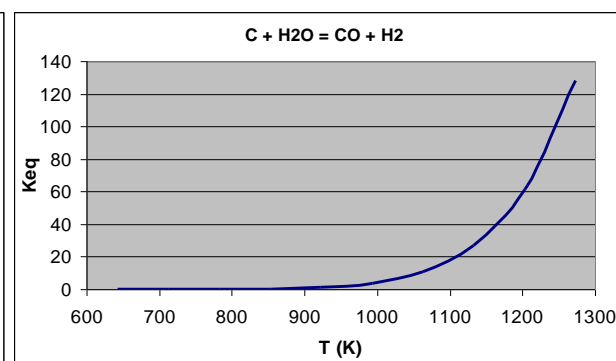
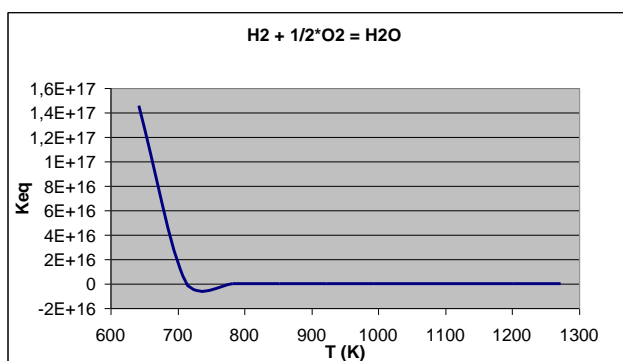
La energía libre de una reacción cambia según la temperatura de proceso, por tanto la espontaneidad de cada reacción también cambiara según la temperatura de proceso. Si ΔG_r

Análisis de la estrategia de modelado de gasificadores de biomasa en lecho fluidizado

es negativo, la reacción es espontánea en el sentido directo, si ΔG_r es cero, la reacción esta en equilibrio, y si ΔG_r es positivo, la reacción en el sentido directo no es espontanea, En cambio, la reacción inversa será espontánea.

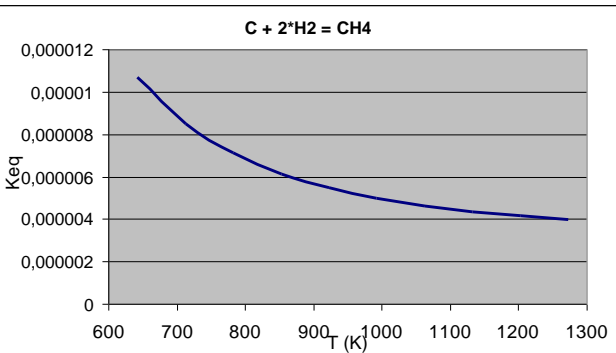
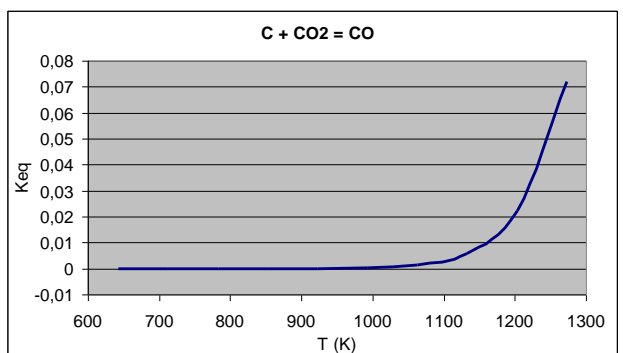


Figuras 22 y 23. Constante de equilibrio de las reacciones R6 y R5 con la temperatura



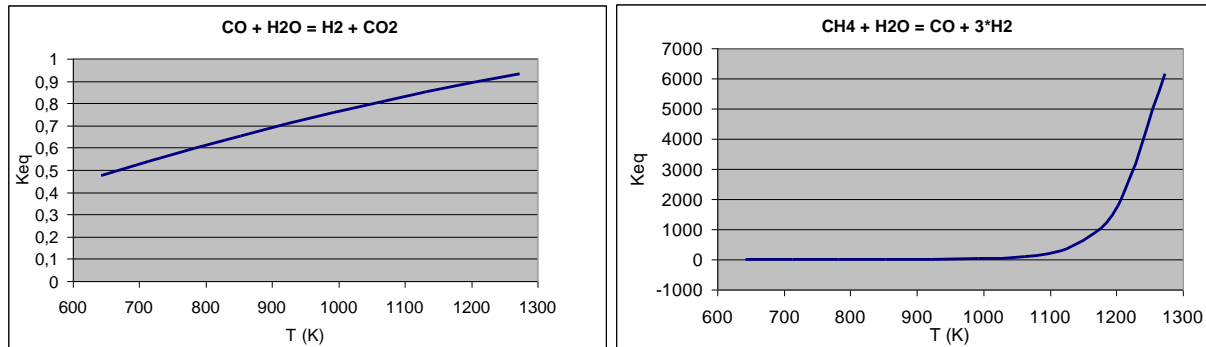
Figuras 24 y 25. Constantes de equilibrio de las reacciones R1 y R 4 con la temperatura

Como se observa en las tres reacciones de combustión, la K_{eq} es muy elevada en un rango de temperatura en torno a 600 – 700 K; el equilibrio de estas reacciones esta desplazado a la derecha, por lo tanto, en torno a estas temperaturas no nos interesa que estén estas reacciones. Por tanto el funcionamiento óptimo del gasificador estará en temperaturas por encima de los 800 K.



Figuras 26 y 27. Constantes de equilibrio de las reacciones R10 y R2 con la temperatura

En las *figuras 25, 26 y 27* se observa que la K_{eq} de las reacciones gas-sólido aumenta en torno a 1100- 1200 K salvo R2. Estas reacciones están desplazadas a la derecha y se producirán en sentido directo; esto interesa ya que si estas reacciones se producen en sentido directo obtendremos H_2 y CO .



Figuras 28 y 29. Constantes de equilibrio de las reacciones R7 y R9 con la temperatura

Si ($K_{eq} \gg 100$) la reacción es directa de reactantes a productos.

Si ($0.01 < K_{eq} < 100$) la reacción es cercana al equilibrio y puede sucederse en cualquiera de los dos sentidos.

Si ($K_{eq} \sim 1$) La velocidad de reacción directa e inversa son similares y por ello no se aprecia reacción química.

A mayor K_{eq} mayor será la conversión en el sentido de reactantes a productos de la reacción. Con el cálculo de las K_{eq} determinamos la importancia de las reacciones en el proceso.

3.3.3 Estudio preliminar

En la introducción de este capítulo, para desarrollar la aplicación basado en el modelo de equilibrio utilizamos el llamado método de relajación [14]. En este método se asume que cada reacción se lleva a cabo en un reactor separado y reaccionan al equilibrio. Esta composición de equilibrio entra en el siguiente reactor que vuelve a alcanzar el equilibrio. Al abandonar el último reactor la composición entra de nuevo al primer reactor y la cadena de cálculo de equilibrio se inicia una segunda vez. Por lo tanto es importante determinar el orden de las reacciones que se van a simular en cascada.

Las velocidades de reacción iniciales sirven para determinar el orden de las reacciones en el modelo en cascada. Las velocidades de reacción se definen en siguiente tabla:

Reacciones	Velocidad de reacción $\left(\frac{\text{mol}}{\text{m}^3 \cdot \text{s}}\right)$	Ref.
$\text{H}_2 + 1/2\text{O}_2 = \text{H}_2\text{O}$	$r_5 = 1.08 \cdot 10^{10} \cdot \exp\left(-\frac{125.525}{R \cdot T}\right) \cdot [\text{O}_2] \cdot [\text{H}_2] \quad (25)$	[16]
$\text{CO} + 1/2\text{O}_2 = \text{CO}_2$	$r_6 = 1.78 \cdot 10^{10} \cdot \exp\left(-\frac{180.132}{R \cdot T}\right) \cdot [\text{CO}] \cdot [\text{H}_2\text{O}]^{0.5} [\text{O}_2]^{0.25} \quad (26)$	[16]
$\text{CO} + \text{H}_2\text{O} = \text{H}_2 + \text{CO}_2$	$r_7 = 2.778 \cdot \exp\left(-\frac{12.56}{R \cdot T}\right) \cdot \left([\text{CO}] \cdot [\text{H}_2\text{O}] - \frac{[\text{CO}_2] \cdot [\text{H}_2]}{K_{7eq}}\right) \quad (27)$	[16]
$\text{CH}_4 + 2\text{O}_2 = \text{CO}_2 + 2\text{H}_2\text{O}$	$r_4 = 1.58 \cdot 10^{19} \cdot \exp\left(-\frac{24343}{R \cdot T}\right) \cdot [\text{CH}_4]^{0.7} \cdot [\text{O}_2]^{0.8} \quad (28)$	[17]
$\text{CH}_4 + \text{H}_2\text{O} = \text{CO} + 3\text{H}_2$	$r_8 = 3.3 \cdot 10^{10} \cdot \exp\left(-\frac{2.4 \cdot 10^5}{R \cdot T}\right) \cdot [\text{CH}_4]^{1.7} \cdot [\text{H}_2]^{0.8} \quad (29)$	[17]

Tabla 9. Velocidades de reacción [16]

Las reacciones se ordenan de forma decreciente desde la reacción con mayor velocidad de reacción hasta la reacción con menor velocidad de reacción. No hace falta calcular Las velocidades de reacción de las reacciones del carbono (gas-sólido) puesto que son reacciones que se suceden lentamente y serán las últimas en el orden de modelización del método de relajación.

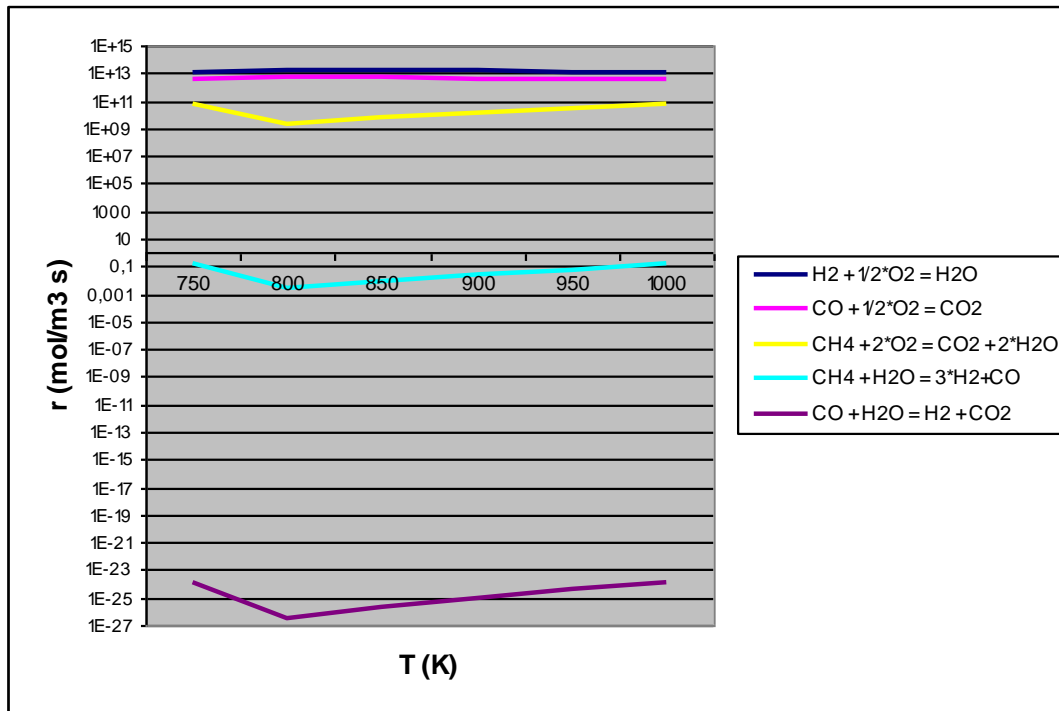


Figura 30. Velocidades de reacción con la temperatura

Se observa que las velocidades de reacción iniciales de las tres reacciones de combustión son muy elevadas, por lo tanto son las tres primeras reacciones que se modelan en la aplicación. Por tanto, el orden de reacción queda de la siguiente forma:

1. $\text{CH}_4 + 2\text{O}_2 = \text{CO}_2 + 2\text{H}_2\text{O}$
2. $\text{H}_2 + 1/2\text{O}_2 = \text{H}_2\text{O}$
3. $\text{CO} + 1/2\text{O}_2 = \text{CO}_2$
4. $\text{CH}_4 + \text{H}_2\text{O} = \text{CO} + 3\text{H}_2$
5. $\text{C} + \text{H}_2\text{O} = \text{CO} + \text{H}_2$
6. $\text{CO} + \text{H}_2\text{O} = \text{H}_2 + \text{CO}_2$
7. $\text{C} + \text{CO}_2 = 2\text{CO}$
8. $\text{C} + 2\text{H}_2 = \text{CH}_4$

3.3.4 Simulación numérica del modelo de equilibrio

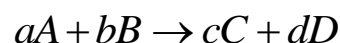
Como se ha comentado con anterioridad, el modelo de equilibrio consistirá obtener la composición de salida de cada especie a partir de introducir la composición de entrada de cada especie (H_2 , N_2 , O_2 , CO , CO_2 , H_2O , CH_4 , C). Por lo tanto, Con los pesos moleculares de cada especie y la definición de los parámetros de funcionamiento, se podrá calcular el gasto (moles/seg) de entrada de cada especie.

Reacciones Directas

Las reacciones directas que se implementan en el modelo son las reacciones irreversibles en sentido directo ($K_{eq} \gg 100$) de tipo gas-gas. En estas reacciones los reactantes se convertirán en productos prácticamente en su totalidad al tener muy elevada la K_{eq} .

Para cada reacción, primeramente se compara los moles que hay de cada reactante para comprobar cuál es el reactante limitante. El reactante limitante es aquel de los dos que se consumirá totalmente. Del reactante que no es limitante sobrarán una cantidad de moles. Los moles que tendremos a la salida de la modelización de cada reacción serán los moles de entrada para la modelización de la siguiente reacción.

Por tanto tenemos:



Si $a \cdot f_A > b \cdot f_B$ entonces el reactante limitante es el “B” y la cantidad de moles de los productos son:

$$f_{Cout} = f_{Cin} + \frac{c}{b} \cdot f_{Bin} \quad (30)$$

$$f_{Dout} = f_{Din} + \frac{d}{b} f_{Bin} \quad (31)$$

$$f_{Aout} = f_{Ain} - \frac{a}{b} f_{Bin} \quad (32)$$

$$f_{Bout} = f_{Bin} - f_{Bin} \quad (33)$$

Por el contrario si $a \cdot f_A < b \cdot f_B$ entonces el reactante limitante es el A y la cantidad de moles de los productos son:

$$f_{Cout} = f_{Cin} + \frac{c}{a} \cdot f_{Ain} \quad (34)$$

$$f_{Dout} = f_{Din} + \frac{d}{a} f_{Ain} \quad (35)$$

$$f_{Aout} = f_{Ain} - f_{Ain} \quad (36)$$

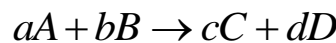
$$f_{Bout} = f_{Bin} - \frac{b}{a} f_{Ain} \quad (37)$$

Se observa que a los moles de entrada de cada especie hay que sumarle los moles de conversión correspondiente de la especie limitante. De la ecuación estequiométrica se deduce la relación de moles de conversión entre el reactante limitante y el producto. Los moles de salida de cada especie después de la modelización de cada reacción serán los moles de entrada en la modelización de la siguiente reacción. Por tanto los moles de salida de la reacción 1 serán los moles de entrada de la reacción 2 y así sucesivamente. Ver Ejemplo en *Anexo 2*.

Reacciones con $0.01 < K_{eq} < 100$

En las siguientes reacciones de tipo $0.01 < K_{eq} < 100$, los reactantes no se convierten en su totalidad en productos, sino que será un porcentaje de los moles de los reactantes o de los productos los que se conviertan hasta alcanzar el equilibrio.

Siendo la reacción de la forma:



Se define también la Constante de Equilibrio (K_{eq}) como el cociente de las concentraciones de los productos y los reactantes en el equilibrio ($t=\infty$ seg):

$$K_{eq} = \frac{[C]^c \cdot [D]^d}{[A]^a \cdot [B]^b} \quad (38) \quad [14]$$

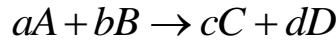
Primero, se calcula las concentraciones de cada especie. Se define como el número de moles entre el volumen del lecho fluidizado.

Para ver el sentido en el que ocurren las reacciones se compara el producto de la K_{eq} y las concentraciones de reactantes con las concentraciones de los productos.

Si sucede en $t=0$ seg:

$$K_{eq} \cdot [A]^a \cdot [B]^b > [C]^c \cdot [D]^d$$

La reacción ocurrirá en el sentido de reactantes a productos. Para calcular el porcentaje de reactantes que se convierte en productos se referencia todas las concentraciones a una de los reactantes.



$$n_1 = \frac{[A]}{[A]} = 1 \quad n_2 = \frac{[B]}{[A]} \quad n_3 = \frac{[C]}{[A]} \quad n_4 = \frac{[D]}{[A]}$$

Entonces tenemos en $t=\infty$ seg:

$$K_{eq} = \frac{[C]^c \cdot [D]^d}{[A]^a \cdot [B]^b} \quad (41)$$

$$K_{eq} = \frac{[n_3 + c \cdot y]^c \cdot [n_4 + d \cdot y]^d}{[1 - a \cdot y]^a \cdot [n_2 - b \cdot y]^b} \quad (42)$$

Donde “y” (conversión relativa de la especie tomada como referencia) es el número de moles transformados de la especie “A” dividido entre el número de moles totales de la especie A que hemos tomado como referencia. Los moles de salida de las especies serán:

$$f_{Cout} = f_{Cin} + y \cdot \frac{c}{a} \cdot f_{Ain} \quad (43)$$

$$f_{Dout} = f_{Din} + y \cdot \frac{d}{a} \cdot f_{Ain} \quad (44)$$

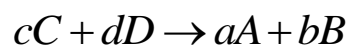
$$f_{Aout} = f_{Ain} - y \cdot f_{Ain} \quad (45)$$

$$f_{Bout} = f_{Bin} - y \cdot \frac{b}{a} \cdot f_{Ain} \quad (46)$$

Por el contrario si sucede en $t=0$ seg:

$$K_{eq} \cdot [A]^a \cdot [B]^b < [C]^c \cdot [D]^d$$

La reacción ocurrirá en el sentido de productos a reactantes de la forma:



En este caso referenciaremos a una de las especies que en este caso es reactante.

$$n_1 = \frac{[C]}{[C]} = 1 \quad n_2 = \frac{[B]}{[C]} \quad n_3 = \frac{[A]}{[C]} \quad n_4 = \frac{[D]}{[C]}$$

$$\frac{1}{K_{eq}} = \frac{[C]^c \cdot [D]^d}{[A]^a \cdot [B]^b} \quad (47)$$

$$t=\infty \text{ seg} \quad \frac{1}{K_{eq}} = \frac{[1 - c \cdot y]^c \cdot [n_4 + d \cdot y]^d}{[n_3 + a \cdot y]^a \cdot [n_2 + b \cdot y]^b} \quad (48)$$

Calculamos “y”, los moles de salida de las especies de salida serán:

$$f_{Cout} = f_{Cin} - y \cdot f_{Cin} \quad (49)$$

$$f_{Dout} = f_{Din} - y \cdot \frac{d}{c} f_{Cin} \quad (50)$$

$$f_{Aout} = f_{Ain} + y \cdot \frac{a}{c} f_{Cin} \quad (51)$$

$$f_{Bout} = f_{Bin} + y \cdot \frac{b}{c} f_{Cin} \quad (52)$$

Ver Ejemplo en *Anexo 4*.

Conversión del Carbono

La conversión del carbono se define como la diferencia entre el carbono de entrada y el carbono no transformado que tenemos a la salida del gasificador, dividido entre el carbono de entrada. Este dato es muy importante puesto que nos hacemos una idea de la eficiencia del proceso.

$$\%C = \frac{C_{in} - C_{out}}{C_{in}} \quad (53)$$

3.4 Modelo cinético

El desarrollo de esta aplicación se hará de acuerdo a la teoría de dos fases de fluidización, donde el lecho fluidizado burbujeante consta de dos fases: una fase de burbuja y una fase de emulsión. La fase de emulsión contiene todas las partículas y una fracción del gas, es continua y se dice que permanecen en condiciones de fluidización incipiente. Y la fase burbuja, que es el exceso de gas, pasa a través de la cama en forma de burbujas [16].

3.4.1 Desarrollo del modelo cinético

Conocer los mecanismos cinéticos que describen la conversión del char durante la gasificación de la biomasa es fundamental para el diseño, evaluación y optimización de los gasificadores.

Como se ha comentado en el apartado de hipótesis generales, *apartado 3.2*, el agente gasificante es aire, cuya función es favorecer las reacciones de combustión (por su contenido en O_2).

En este modelo consideraremos el parámetro:

- Relación de esbeltez. Se define como la relación altura/diámetro (L/D) existente en el lecho del reactor.

3.4.2 Hipótesis del modelo cinético

Un diagrama esquemático del modelo y la representación de las dos fases de la gasificación en lecho fluido se da en la *figura 31*.

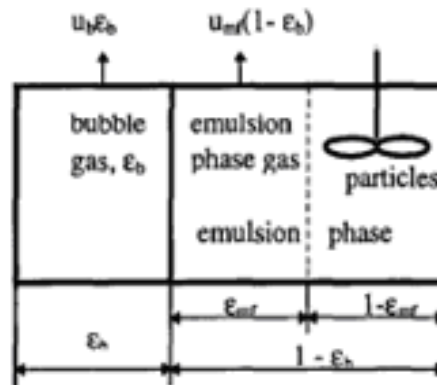


Figura 31. Representación de las dos fases de un lecho fluidizado [16].

La formulación del modelo se basa en los supuestos detallados a continuación:

1. Se trata de un sistema en estado estacionario e isoterma debido a la homogeneidad existente en un lecho fluidizado.
2. Se basa en el principio de altos coeficientes de mezclado/transferencia de materia en la coordenada horizontal.
3. El comportamiento fluidodinámico del lecho fluidizado es descrito por la teoría de las dos fases de fluidización [18], es decir, la fase de emulsión sigue siendo incipiente fluidizada y todo el exceso de gases pasan a través del lecho en forma de burbujas.
4. Se supone mezcla perfecta de medio inerte y medio reaccionante en la fase emulsión, y la fase burbuja se modela como flujo pistón. En un flujo pistón las propiedades de los gases de síntesis varían con la altura del gasificador en la zona de reacción. Se supondrá un régimen de lecho fluidizado burbujeante. En el *capítulo 2.3* se menciona la teoría que

ha llevado a la hipótesis de limitar el rango del estado de fluidización a $1 \leq u_0/u_{mf} \leq 6$ para un régimen de fluidización burbujeante. Se toma una velocidad mínima de fluidización de la resolución de la ecuación de Ergun y Orning [28].

5. El tamaño de la burbuja en el lecho es variable con respecto a la altura del lecho. Las burbujas son de tamaño uniforme en cualquier sección transversal del lecho, pero crecen por coalescencia con otras burbujas y la adición del flujo neto a medida que suben a través del lecho. Para el cálculo de los parámetros del crecimiento de burbuja se utiliza la teoría de Wen y Mori [19].

6. Al igual que en el modelo de equilibrio la volatilización de la biomasa se supondrá instantánea, incluyéndola a la entrada del lecho, estando formados principalmente por H_2 , CO , CO_2 , H_2O , CH_4 [15]. Estas especies se distribuyen de forma uniforme dentro del gas. Las correlaciones empleadas para el cálculo de las fracciones másicas están descritas en el apartado 3.2

7. Se considera transferencia de masa entre las partículas y la fase de gas de la emulsión, y entre la burbuja y la fase de la emulsión por difusividad molecular (impulsada por las diferencias de concentración) y convección (flujo de gas sobrante de la fase de emulsión a la fase de burbuja) [5].

8. Propiedades fluidodinámicas invariables con la temperatura y las partículas de biomasa son esféricas y de tamaño uniforme.

3.4.3 Esquema de las reacciones

En el modelo implementado se suceden de forma instantánea los procesos de secado y pirólisis. El char se modela como carbono (grafito). En la *Tabla 8* se muestran las reacciones tenidas en cuenta para el desarrollo de esta aplicación.

Reacciones heterogéneas

Las reacciones heterogéneas (gas-sólido) tienen lugar la fase emulsión, según la teoría de las dos fases de Toomey y Johnstone [18]. Estas reacciones se caracterizan por tener una cinética lenta, puesto que es un fenómeno que ocurre en la superficie del sólido. Esto supone que el grado de gasificación general puede ser controlado por la zona de reducción del char, a través de la temperatura de reacción, el tiempo de residencia y la masa del lecho.

Reacciones homogéneas

Por otra parte, las reacciones homogéneas (gas-gas) se dan en fase burbuja y emulsión, siguiendo una cinética más rápida que las reacciones heterogéneas, por lo tanto, estas reacciones condicionaran a las reacciones heterogéneas.

3.4.4 Ecuaciones de conservación

Las siguientes ecuaciones forman un sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias (EDO), y representan la conservación de masa de la fase gas en un volumen de control para las fases de burbuja y emulsión, respectivamente. Las ecuaciones de conservación de materia para cada especie en cada fase están desarrolladas en la *tabla 29* del *anexo 6*. Se componen de tres términos:

1. El primero corresponde a la transferencia de materia entre fases burbuja y emulsión.
2. El segundo, incorpora el término de flujo neto, explicado en el *apartado 3.4.5*
3. El último representa la cinética de las reacciones tenidas en cuenta (Difusividad molecular), puesto que la influencia la marcan las velocidades de reacción y los coeficientes estequiométricos.

Fase Burbuja:

$$\frac{df_{Bi}}{dz} = A \left[a_B k_{BEi} (C_{Ei} - C_{Bi}) + \Delta F_{Ei} + \varepsilon_b \sum_{j=1}^{N_B} \alpha_{ij} r_{Bj} \right] \quad (54)$$

Fase de emulsión:

$$\begin{aligned} \frac{df_{Ei}}{dz} = & A [a_B k_{BEi} (C_{Bi} - C_{Ei}) - \Delta F_{Ei} + \\ & (1 - \varepsilon_b) \left(\varepsilon_{mf} \sum_{j=1}^{N_E} \alpha_{ij} r_{Ej} + (1 - \varepsilon_{mf}) \left[\sum_{j=1}^{N_c} a_s \alpha_{ij} r_{Ecj} + \sum_{j=1}^{N_g} \alpha_{ij} r_{Egj} + \sum_{j=1}^{N_v} \alpha_{ij} r_{Evj} \right] \right) \end{aligned} \quad (55)$$

Donde f_{Bi} y f_{Ei} son el caudal molar de cada especie en fase burbuja y emulsión respectivamente.

Las condiciones de contorno son:

$C_{Ei} = C_{Bi} = C_{0i}$, a la entrada ($z=0$). Este parámetro corresponde al vector de concentración inicial de cada una de las “ i ” especies existentes en las reacciones, eliminando las cenizas de la biomasa, y teniendo en cuenta volatilización instantánea (H_2 , CO , CO_2 , H_2O , CH_4) humedad relativa de la biomasa (HR), y entrada de aire (O_2 y N_2).

Para la resolución de las ecuaciones de conservación, es importante notar que inicialmente vienen en función de dos incógnitas (caudal molar, f y concentración, C) que guardan una relación proporcional, reflejada en las siguientes ecuaciones.

Fase burbuja ($z > 0$):

$$f_{Bi} = C_{Bi} \cdot A \cdot u_b \cdot \varepsilon_b \quad (56)$$

Fase emulsión ($z > 0$):

$$f_{Ei} = C_{Ei} \cdot A \cdot u_{mf} \cdot (1 - \varepsilon_b) \quad (57)$$

Por lo tanto, las ecuaciones 54 y 55 se dejan en función de las concentraciones en fase burbuja y emulsión, quedando un sistema de EDOs no lineales para su resolución por el método de Runge-Kutta 4.

3.4.5 Término del flujo neto

Viene definido por la generación neta de gas en fase emulsión debido a las reacciones de volatilización, homogéneas y heterogéneas que se ha tenido en cuenta. Teniendo en cuenta que las distintas especies contribuyen de forma individual al flujo neto, se definen los términos mediante las siguientes ecuaciones.

$$\Delta F_{Ei} = \Delta F_E Y_{Ei} = \Delta F_E C_{Ei} / \sum_{i=1}^{N_E} C_{Ei} \quad (62)$$

$$\Delta F_{Ei} = \frac{C_{Ei}}{\sum_{i=1}^N C_{Ei}} \sum_{i=1}^{N_E} \left[(1 - \varepsilon_b) \left(\varepsilon_{mf} \sum_{j=1}^{N_E} \alpha_{ij} r_{Ej} + (1 - \varepsilon_{mf}) \left[\sum_{j=1}^{N_c} a_s \alpha_{ij} r_{Ecj} + \sum_{j=1}^{N_g} \alpha_{ij} r_{Egj} + \sum_{j=1}^{N_v} \alpha_{ij} r_{Evj} \right] \right) \right] \quad (63)$$

La teoría de las dos fases define el caudal de gas en exceso como:

$$u_{ex} = u_0 - u_{mf} \quad (64)$$

El flujo neto es función de las velocidades de reacción en la fase emulsión, lo que conlleva una relación con la temperatura y la concentración de cada especie en la fase emulsión (por definición de velocidad de reacción).

3.4.6 Régimen de fluidización

Se considera un lecho de partículas soportado sobre un distribuidor diseñado para flujo ascendente uniforme. Para que tenga lugar la fluidización, debe cumplirse que el peso de las partículas sólidas sea igual o menor a las fuerzas de arrastre del gas en movimiento en ascenso a través del lecho. La velocidad de mínima fluidización, se calcula mediante la resolución de la ecuación de Ergun y Orning [28].

El tamaño de burbuja es uno de los parámetros más críticos en el modelado de un lecho fluidizado: afecta a la velocidad de crecimiento de burbuja, la proporción de cada componente en las fases burbuja y emulsión, mezclado de sólidos, y la transferencia de

masa entre fases. La coalescencia de burbujas da lugar a su crecimiento a medida que se incrementa la altura del lecho. Muchas correlaciones han sido publicadas para predecir la distribución axial de los tamaños de burbuja. Las correlaciones desarrolladas por Mori and Wen [19] para un distribuidor de plato perforado con n_d orificios, como se expresa en las siguientes ecuaciones, son las utilizadas en este trabajo.

El modelo incluye un gas perfectamente mezclado en la región de entrada, coalescencia y crecimiento de las burbujas como función de la altura de lecho.

Diámetro de burbuja en función de la altura de lecho:

$$d_b = D_{BM} - (D_{BM} - D_{B0}) \cdot \exp\left(\frac{-0.3z}{D_t}\right) \quad (67)$$

Se define D_{B0} y D_{MB} : como

$$D_{B0} = \frac{0.347 \cdot \left(\frac{A(100)^2 \cdot (u_0 - u_{mf}) \cdot 100}{n_d} \right)^{0.4}}{100} \quad (65)$$

$$D_{MB} = \frac{0.652 \cdot (A(100)^2 \cdot (u_0 - u_{mf}) \cdot 100)^{0.4}}{100} \quad (66)$$

Las correlaciones desarrolladas de Babu (68 y 69) [16] sirven para conocer la expansión del lecho fluidizado.

$$B = \frac{L}{L_{mf}} = 1 + \frac{10.978 \cdot (u_0 - u_{mf})^{0.738} \cdot \varphi_s^{0.376} \cdot d_p^{1.006}}{u_{mf}^{0.937} \cdot \varphi_g^{0.126}} \quad (68)$$

$$\varepsilon_b = 1 - \frac{1}{B} \quad (69)$$

Velocidad de crecimiento de burbuja:

$$u_b = u_0 - u_{mf} + 0.711 \cdot (grav \cdot d_b)^{0.5} \quad (70)$$

La fracción de vacío en el lecho queda de la manera:

$$\varepsilon_f = \varepsilon_b + (1 - \varepsilon_b) \cdot \varepsilon_{mf} \quad (71)$$

3.4.7 Simulación numérica del modelo cinético

A continuación se pasará a realizar una simulación de la aplicación basada en el modelo cinético. Antes de realizar la simulación se tendrán en cuenta varias consideraciones acerca del modelo cinético.

1. Se supone un valor inicial de la conversión total de carbón, X_c , asumiendo que es constante a lo largo del lecho de acuerdo con la suposición de que los sólidos están perfectamente mezclados. Esta variable depende de las velocidades de reacción de las

reacciones heterogéneas (gas-sólido) que, a su vez, son función de la composición del gas, temperatura y presión de operación.

2. Se ha optado por elegir un número de pisos de manera que las composiciones resultantes finales no difieran más de un 1% si se aumenta en 1000 unidades el número de pisos por los que se divide la altura del lecho. Bajo este criterio, se ha estimado que el $n_{pisos}=20000$, suponiendo un paso (altura del volumen de control) igual a L / n_{pisos} , variable según el valor de la altura de lecho. La elección del número de pisos es de suma importancia, puesto que determina la precisión del cálculo iterativo, pudiendo ser motivo de resultados erróneos si no se elige correctamente.

3. Se consideran 7 especies en estado gaseoso para el conjunto de las reacciones, CO, CO₂, CH₄, H₂, H₂O, N₂ y O₂. El punto de partida para la resolución del sistema de 14 ecuaciones diferenciales (7 por fase, burbuja y emulsión, ver *Anexo 6*) para las especies consideradas es la zona inferior del lecho, a una altura $z = 0$ (a la salida de la placa de orificios), donde los caudales de gases fluidizados se calculan previamente. A la entrada del lecho, la concentración de los gases en fases burbuja y emulsión es igual; además, se ha tenido en cuenta la velocidad superficial del gas, u_0 , para el cálculo de la concentración en ambas fases:

$$C_{Bi}(z=0) = C_{Ei}(z=0) = \frac{m_i}{PM_i \cdot A \cdot u_0} \quad (72)$$

4. Se calcula, para el piso k, el diámetro de burbuja (d_b), velocidad de crecimiento de burbuja (u_b), flujo neto (ΔF_{Ei}), fracciones másicas, transferencia de masa y velocidades de reacción.

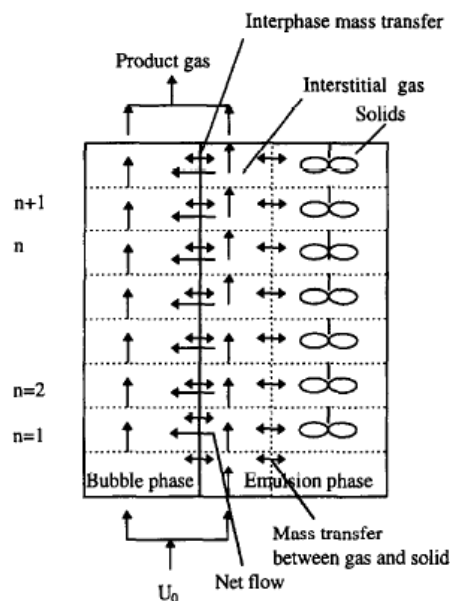


Figura 32. Esquema de la división de fases y balance de materia en el lecho fluidizado

5. Un punto clave del modelo es la forma de relacionar el agotamiento de la biomasa y la aparición de los gases a medida que se va desarrollando la cinética de las reacciones gas-sólido y gas-gas. Se utiliza una adaptación de acuerdo a la fórmula que aparece en la publicación de Avdresh [23]:

$$f_{char}(k+1) = f_{char}(k) + V_{VC}(k) \cdot Rt_{char}(k) \quad (73)$$

Donde $Rt_{char}(k)$ tiene en cuenta las velocidades de reacción (en el piso k) para el agotamiento de carbón en las reacciones heterogéneas.

6. Se resuelven los balances másicos del piso actual para la obtención de las concentraciones de las fases burbuja y emulsión del piso siguiente. Se obtienen los valores de concentración para las fases burbuja y emulsión (de todos los componentes) en cada fracción de lecho.

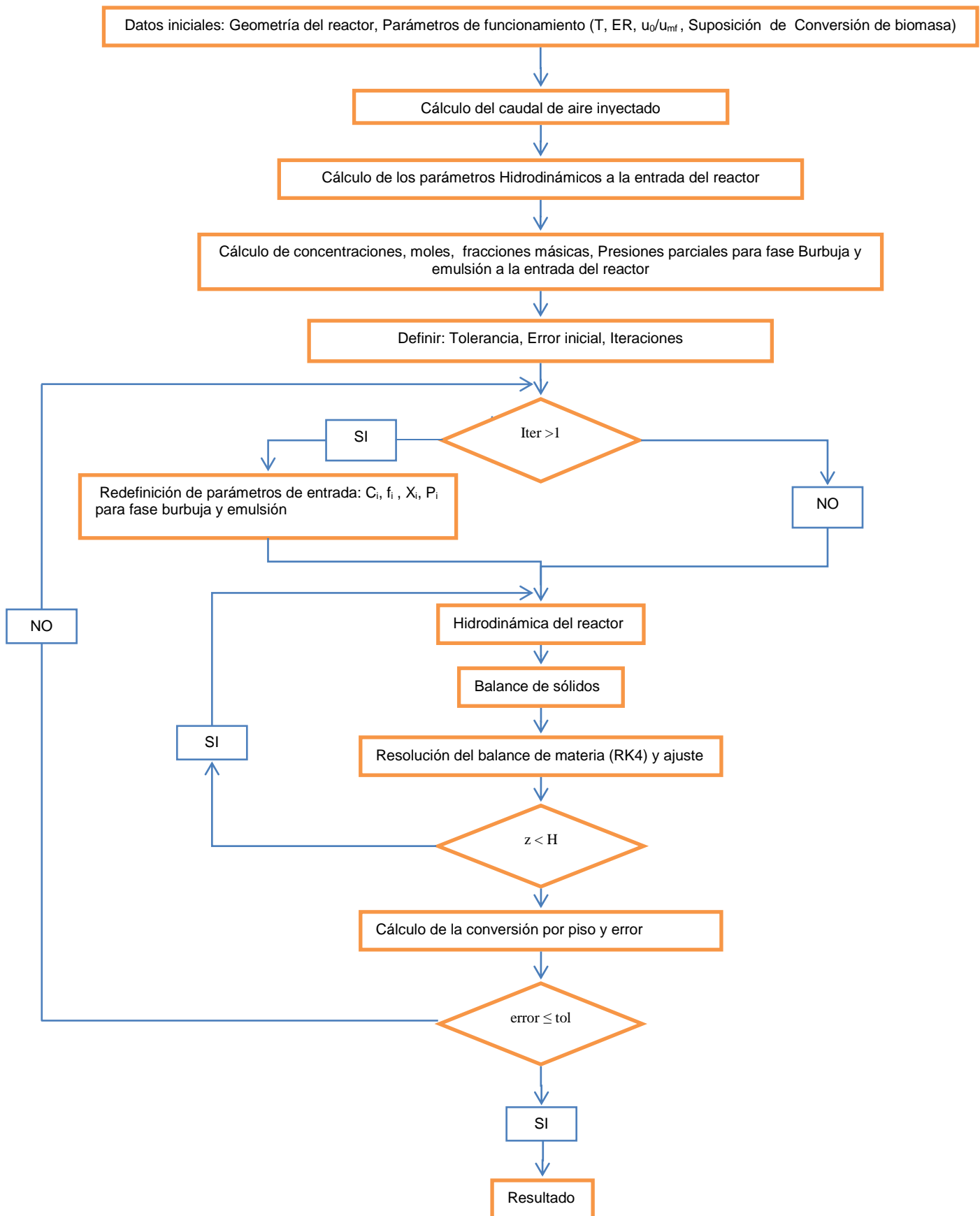
7. La fracción de conversión de char es calculada a partir de los caudales molares de char a la entrada del lecho, con respecto a la cantidad que queda a la salida del lecho. La conversión de carbón/biomasa (X_c) se define como:

$$X_c = \left(1 - \frac{f(L)}{f(z=0)} \right) \cdot 100 \text{ (\%)} \quad (74)$$

8. El resultado de la conversión es comparado con el valor previamente asumido. Si el error obtenido por la ecuación 75 es mayor que la tolerancia, la conversión calculada pasa a ser el valor de conversión supuesto y se repiten los pasos 3-7, hasta que se satisfacen todos los criterios de convergencia.

$$Error_c = \left(1 - \frac{X_c(z=L)}{X_c(z=0)} \right) \cdot 100 \text{ (\%)} \quad (75)$$

3.4.8 Diagrama de flujo: Modelo cinético



4. SIMULACIONES Y RESULTADOS

En el presente capítulo se explicará detalladamente la forma de resolución de los modelos cinético y de equilibrio, junto con los valores elegidos para las simulaciones.

Se procederá a la elaboración de sendos análisis de sensibilidad para ambos modelos, el de equilibrio y el cinético. Las variables de estudio cuya influencia se va a estudiar en el rendimiento del reactor serán las típicas de un proceso de gasificación: *Temperatura* del lecho, *Dosado* y *Estado de fluidización*. Finalmente, se discutirán los resultados de las tendencias presentadas por las variables operativas para cada modelo predictivo, así como las posibles diferencias de los resultados con trabajos experimentales. Por lo tanto, con este análisis, se podrá establecer las posibles causas de discrepancias entre los resultados predichos por ambos modelos y los experimentales. Con esto se podrá determinar los puntos fuertes y los puntos débiles de cada modelo y se tratará de dilucidar cuáles pueden ser las principales limitaciones para cada modelo en la simulación del proceso objeto de estudio. Con esto, finalmente, se podrá definir unas pautas para la mejora de este tipo de herramientas de simulación para el ahorro de coste de fabricación y experimentación de tales reactores.

4.1 Simulaciones

4.1.1 Descripción del proceso

Se realizarán simulaciones tomando como referencia las publicaciones de Yan [16], Petersen [14] y Corella [22] para definir los parámetros geométricos del gasificador y los rangos de las variables de operación. Así pues, se utilizará los parámetros geométricos de una instalación a escala comercial, proceso Winkler [12].

La biomasa se transporta en una cinta hasta llegar a una tolva, conectada al gasificador mediante dispositivo de tornillo sinfín (que regula el caudal de entrada de combustible). En la *figura 33* se puede apreciar un esquema del funcionamiento de esta instalación. Aguas abajo del gasificador, se introduce una corriente de agente gasificante, induciendo mediante un calentador una temperatura superior a la de reacción, reduciendo el contenido en alquitrán del gas de síntesis. Un ciclón separará la corriente depurada de gas de síntesis y las cenizas, incrementando la eficiencia del proceso.

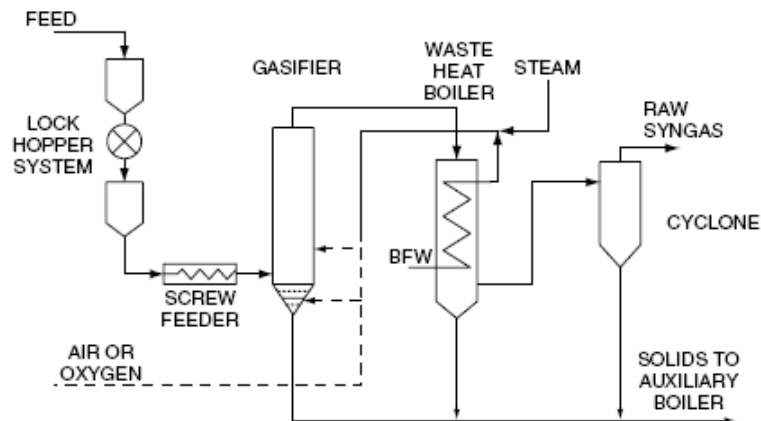


Figura 33. Gasificación en lecho fluido: Winkler a presión atmosférica [12]

La figura 34 se focaliza en el reactor. La biomasa se introduce por la parte inferior del reactor, sobre el lecho, una vez que el medio está fluidizado mediante aire entrante por el distribuidor. Las cenizas generadas caen por la parte inferior del reactor, mientras que el gas de síntesis sale por la parte superior.

Las cenizas y los tars no se tienen en cuenta en la simulación debido a su complejidad, escapan al alcance del presente proyecto y no hay demasiada información al respecto, en especial al efecto en la cinética global.

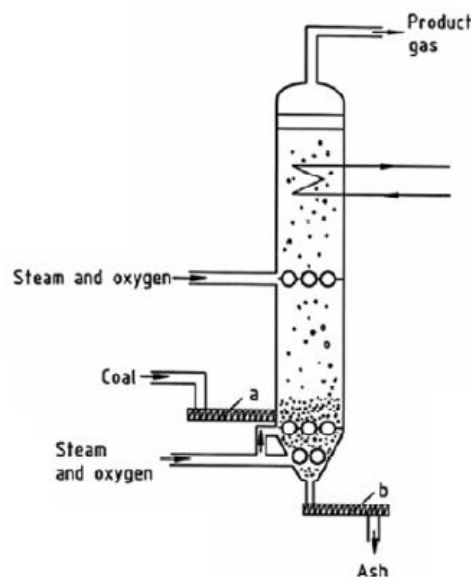


Figura 34. Instalación de gasificación Winkler[12].

4.1.2 Variables de operación

Los resultados de las simulaciones de los distintos modelos (cinético y de equilibrio) se compararán con resultados experimentales como prueba de verificación para cada modelo. La tabla 10 muestra los valores estándar utilizados para las simulaciones.

Los parámetros *Estado de fluidización*, *Equivalence ratio (dosado)* y *Temperatura* son los más influyentes (tabla 10) en la composición de los gases de síntesis a la salida del

lecho y en la conversión de la biomasa, por lo tanto, realizaremos simulaciones a distintos valores de estos parámetros dentro de los rangos típicos de funcionamiento obtenidos de otros estudios [16] [14] [22].

Parámetro		Unidades	Valor
Diámetro del reactor	D	m	4
Número de agujeros del distribuidor	n_d	-	3000
Estado de fluidización	$x=u_0/u_{mf}$	-	1,2 - 6
Equivalence Ratio	ER	-	0,23 – 0,35
Temperatura	T	$^{\circ}C$	750 - 900
L/D		-	1,5
Diámetro de las partículas	d_p	m	$1,25 \cdot 10^{-3}$
Porosidad del lecho	ε_{mf}	-	0,4
Difusividad del gas	D_g	m^2/s	$8.677 \cdot 10^{-5} \cdot \left(\frac{T^{1.75}}{P} \right)$
Fracción másica de volátiles a la entrada del reactor	X_{mv}	-	0,45

Tabla 10. Valores de estándar utilizados para las simulaciones [14] [16] [22].

La diferencia entre ambos modelos radica sobre todo en que el modelo de equilibrio se basa en el equilibrio termodinámico de las especies reaccionantes presentes en el sistema, de tal manera que para desarrollar dicho modelo no hace falta conocer los mecanismos cinéticos de conversión del char durante la gasificación de la biomasa, por lo tanto, la variable u_0/u_{mf} no tendrá influencia en las simulaciones del modelo de equilibrio. Sin embargo, para desarrollar el modelo cinético hace falta conocer los mecanismos cinéticos que describen la conversión de char durante la gasificación. Por lo tanto, para el análisis de sensibilidad del modelo cinético, se realizarán un total de 36 simulaciones como resultado de la combinación de tres valores del u_0/u_{mf} , tres valores de dosado y cuatro valores de temperatura dentro de los rangos mostrados en la *tabla 10*, mientras que para el análisis de sensibilidad del modelo de equilibrio se realizarán 12 simulaciones, como resultado de simular tres valores de dosado con cuatro valores de la temperatura dentro de los rangos mostrados en la *tabla 10*. Por otro lado, para el análisis comparativo de resultados se realizarán 4 simulaciones en cada modelo, en las mismas condiciones de operación en las que se han obtenido los resultados experimentales.

En el *Anexo 5* se pueden ver las *tablas 27 y 28*, las cuales muestran todas las simulaciones que se han realizado para el análisis de sensibilidad a causa de combinar distintos valores de temperatura, dosado y u_0/u_{mf} .

Las simulaciones realizadas dan un volumen inmanejable de resultados y gráficas, dando una extensión muy grande al PFC. En consecuencia, en los siguientes puntos, tanto para el análisis comparativo de resultados como para el análisis de sensibilidad de ambos

modelos, se mostrarán los resultados de aquellos casos representativos, con el fin de tener un volumen manejable de resultados con los que establecer las posibles causas de discrepancias entre los resultados obtenidos y los experimentales.

4.1.3 Análisis comparativo

Entre las numerosas fuentes existentes, los modelos de simulación implementados se adaptan a gasificadores de biomasa en lecho fluidizado estudiados por otros autores [20] [22] [26] por el tipo de gasificación utilizada (con aire) y la similitud de las condiciones de operación. Por lo tanto, en las *tablas 11, 12 y 13* [20] [22] [26] se muestran los resultados experimentales de estudios realizados por otros autores a los cuales se adaptan nuestros modelos, con el fin de hacer una comparación de resultados para una verificación de los modelos.

Gases		Lamina de eucalipto	Residuos forestales
CO	[vol%]	15,3	11,8
CO ₂	[vol%]	14	14,8
H ₂	[vol%]	11,3	10,3
CH ₄	[vol%]	4,3	4,6
C ₂ H ₂	[vol%]	0,2	0,8
H ₂ O	[vol%]	11,5	13,4
N ₂ +Ar	[vol%]	43,3	43,9

Tabla 11. Composición del gas experimental al gasificar distintos tipos de combustible [20]

Parámetros típicos de operación y resultados experimentales de gasificar madera de pino con aire						
Nº de experimento	1	2	3	4	5	6
ER	0,32	0,37	0,47	0,26	0,36	0,32
H/C	2,2	2,1	2,2	2,1	2,3	2
T (°C)	800	800	810	800	790	800
u ₀ /u _{mf}	1,9	1,9	1,9	1,9	2,2	2,2
H ₂ (vol %, en base seca)	7,0	9,5	8,0	9,5	9,5	9,5
CO (vol %, en base seca)	14,0	13,0	10	13,0	13,0	18,0
CO ₂ (vol %, en base seca)	13,5	15,0	12,0	15,0	15,0	13,5
CH ₄ (vol %, en base seca)	3,0	2,7	2,4	2,7	2,7	4,5
N ₂	61,3	58,3	66,5	58,3	58,3	45,0
PCI	(MJ/Nm ³)	4,3	4,6	3,7	4,6	4,6

Tabla 12. Parámetros típicos de funcionamiento y resultados de algunos experimentos de gasificación de madera de pino [22].

Parámetros típicos de operación y resultados experimentales de gasificar hueso de aceituna con aire							
Nº de experimento	1	2	3	4	5	6	7
u_0/u_{mf}	1,2	1,2	1,2	1,2	1,3	1,2	1,2
Flujo de aire (Nm ³ /h)	20	18	19	18	20	18	18
Consumo de char (kg/h)	35	27	26	24	25	18	18
T (°C)	700	740	750	760	785	780	820
CH ₄ (vol %, en base seca)	6	6	7	7	7	5	5
CO (vol %, en base seca)	14	12	12	10	11	13	14
CO ₂ (vol %, en base seca)	18	17	20	17	17	16	16
H ₂ (vol %, en base seca)	12	11	12	12	11	10	9
ER	0,17	0,20	0,22	0,23	0,24	0,29	0,31
PCI (MJ/Nm ³)	5,21	4,85	5,31	4,93	4,63	4,51	4,52
Conversión de char (%)	74,3	73,4	82,7	79,2	86,1	85,1	85,7

Tabla 13. Parámetros típicos de funcionamiento y resultados de algunos experimentos al gasificar hueso de aceituna (orujillo) con aire. [26]

Por otra parte, la *tabla 14* [20] muestra el poder calorífico inferior (PCI) de gases combustibles típicos producidos en procesos de gasificación, pudiendo encontrar los necesarios (CO, H₂, CH₄) para evaluar la eficiencia térmica del proceso de conversión de biomasa, mediante la *ecuación 76*. Los resultados obtenidos de esta ecuación podrán ser comparados con los valores típicos que se obtienen experimentalmente en procesos de gasificación de biomasa: 4-7 MJ/Nm³ [19].

$$PCI_{syngas} = X_{CH_4} \cdot PCI_{CH_4} + X_{H_2} \cdot PCI_{H_2} + X_{CO} \cdot PCI_{CO} \quad (76)$$

Gas Combustible	Poder Calorífico inferior (MJ/Nm ³)
Metano	32,8
Etano	58,4
Hidrógeno	9,9
Monóxido de Carbono	11,6

Tabla 14. Valores de PCI de gases combustibles formados comúnmente en procesos de gasificación [13].

En el análisis comparativo se mostrará una tabla que contendrá los siguientes resultados (a la salida del lecho): composición de gas de síntesis en base seca, conversión de biomasa y poder calorífico del combustible para cada modelo de simulación junto con los resultados experimentales. Las condiciones de operación en los que se han obtenido los resultados de las simulaciones son las mismas condiciones de operación en las que se han obtenido dichos resultados experimentales. También, se mostraran gráficas comparativas de los órdenes de magnitud de los resultados de las simulaciones y los experimentales. Además, se mostraran los resultados de varios casos particulares representativos para cada modelo con el fin de profundizar en el estudio. También, para el modelo cinético, se mostrará una gráfica la cual pueda dar una idea de los órdenes de magnitud de la composición de gas de síntesis a lo largo del lecho.

4.1.4 Análisis de sensibilidad

La *tabla 15* muestra los rangos de variación de los parámetros más influyentes en la composición de los gases de síntesis a la salida del lecho y en la conversión de la biomasa.

Parámetro de sensibilidad	Rango de variación
Temperatura (°C)	750 - 900
Equivalence Ratio (-)	$0,25 \leq ER \leq 0,35$
Estado de fluidización (-)	$1,2 \leq x \leq 6$

Tabla 15. Rangos típicos de operación (T, ER, u_0/u_{mf}) de un gasificador de lecho fluidizado para biomasa. Valores adoptados para los análisis de sensibilidad realizados.

Como punto de partida, se toman los resultados obtenidos en plantas de gasificación [25] que se encuentran en operación con el objeto de adelantar los resultados de las simulaciones.

Temperatura

En la práctica, al aumentar la temperatura en un proceso de gasificación aumenta el consumo de O_2 , produciéndose un mayor agotamiento de la biomasa, lo que conlleva un incremento de la conversión del mismo. Un aumento de temperatura en los rangos típicos de operación (750-900°C) favorece el enriquecimiento del gas de síntesis en CO y H_2 , con motivo de mayores incrementos en las velocidades de reacción que favorecen la creación de estos compuestos con respecto al resto de compuestos pertenecientes al gas de síntesis final. En el rango 750-800°C al crecer la temperatura, la naturaleza endotérmica de las reacciones que producen H_2 tiende a un aumento de éste, y una disminución de CH_4 . Para las temperaturas 850-900°C se espera un dominio de las reacciones que favorecen el incremento de CO. El aumento de temperatura permite aumentar el rendimiento de conversión de biomasa.

ER, estado de fluidización y relación de esbeltez

Cualquier variación de uno de ellos modifica el tiempo de residencia de las reacciones en el lecho. El tiempo de residencia crece con la relación de belleza (H/D), e inversamente proporcional al estado de fluidización y el Equivalence ratio (ER). ER y el estado de fluidización son proporcionales a un aumento de la velocidad superficial del gas. La *figura 34* muestra un aumento del grado de conversión de carbón con el ER, llegando a un óptimo para $ER=0.26$. Aunque para realizar el análisis de sensibilidad para el estado de fluidización se debe dejar como constante el término de temperatura, lo cierto es que un aumento de " $x=u_0/u_{mf}$ " supone la inyección de un mayor caudal de O_2 , dando lugar a mayor oxidación parcial del combustible, aumentando el grado de conversión. A esto se le debe añadir que un aumento de la velocidad superficial del gas disminuye el tiempo de

residencia de los gases en el seno del lecho fluidizado, disminuyendo el grado de conversión de biomasa en consecuencia. Por lo tanto, todo parece indicar que existirán determinadas condiciones de operación en las que se optimice el proceso, obteniendo la mejor calidad posible de gas de síntesis para una alta conversión de biomasa.

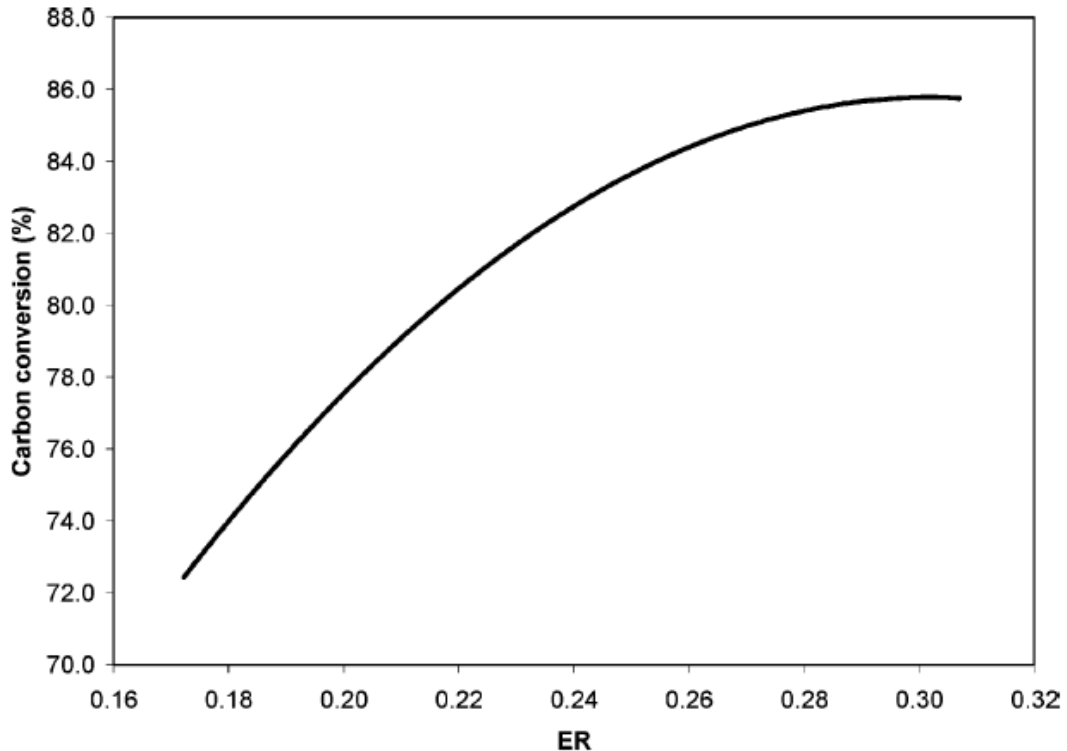


Figura 34. Variación de la conversión de biomasa con el dosado (ER) para un gasificador de lecho fluidizado burbujeante [26].

4.2 Análisis comparativo

Es necesario comentar que un modelo de simulación no deja de ser la implementación de una serie de ecuaciones matemáticas, llevando a cabo la reproducción de un fenómeno bajo unas condiciones experimentales dadas, por lo que cualquier diferencia entre los resultados de la simulación respecto a los experimentales elegidos para comparar, será perfectamente discutible mediante el modelo elegido y las hipótesis aplicadas en cada modelo. A continuación se exponen los resultados de las simulaciones.

4.2.1 Estudio de verificación de modelados

Como se ha expuesto anteriormente en el apartado *Simulaciones 4.1*, se han realizado simulaciones en ambos modelos y en las mismas condiciones de operación en las que se han obtenido los resultados experimentales, con el fin de comparar los órdenes de magnitud de los resultados de las simulaciones con respecto los resultados experimentales para una verificación del modelo. A continuación, se muestran los resultados de las simulaciones junto con los resultados experimentales de bibliografía en la *tabla 16*.

T (°C)	760	785	780	820
ER	0,23	0,24	0,29	0.31
u₀/umf	1,2	1,3	1,2	1,2

Resultados experimentales [26]	CH₄ (vol %, en base seca)	7	7	5	5
	CO (vol %, en base seca)	9	10	13	14
	H₂ (vol %, en base seca)	12	11	10	9
	PCI (MJ/Nm³)	5	4,7	4,5	4,6
	Conversión de char (%)	79	86	85	85

Resultados Modelo de equilibrio	CH₄ (vol %, en base seca)	8	6,5	6	5,2
	CO (vol %, en base seca)	9	10	12	13
	H₂ (vol %, en base seca)	36	36	37	37
	PCI (MJ/Nm³)	7	6,9	6,7	6,5
	Conversión de char (%)	36	36,8	37	39

Resultados Modelo cinético	CH₄ (vol %, en base seca)	1,2	0,9	0,5	0,3
	CO (vol %, en base seca)	12	11,7	11,3	10,9
	H₂ (vol %, en base seca)	11,8	11,2	10,5	9,6
	PCI (MJ/Nm³)	3,5	3,2	2,7	2,6
	Conversión de char (%)	76	81	84	88

Tabla 16. Resultados de la simulación de ambos modelos y experimentales para unas determinadas condiciones de operación.

A continuación, se muestran las gráficas comparativas de los órdenes de magnitud de resultados de las simulaciones con respecto a los resultados experimentales a fin de poder comparar más intuitivamente los errores de composición de gas de síntesis, conversión de char y PCI de cada modelo y verificar los modelos en la medida de lo posible.

De acuerdo al modelo de equilibrio, en lo que a composición de gas de síntesis, respecta, comparando órdenes de magnitud de los resultados de las simulaciones con los resultados experimentales, se puede apreciar un valor alto en la composición de H₂ como muestra la *figura 35*, en donde los resultados de composición de H₂ presentan valores 3 veces superiores a los valores experimentales. Una posible respuesta a la alta composición de H₂ obtenido, puede estar en el método empleado para el desarrollo del modelo de equilibrio, el llamado método de relajación explicado en el *apartado 3.3*, de tal manera que es muy importante las reacciones consideradas y el orden de dichas reacciones para el desarrollo del modelo. Por lo tanto, una explicación al alto valor en la composición de H₂ en nuestros resultados puede ser a causa de considerar 3 reacciones de gasificación que producen H₂, ordenadas en una posición que prevalecen sobre las demás reacciones de

gasificación también consideradas, ver *apartado 3.3.3*. Sin embargo, en las *figuras 36, 37* se puede apreciar como el modelo de equilibrio presenta valores de composición de CO con un error de menor del 10% y valores de composición de CH₄ con un error entre 10%-20%, con respecto a los resultados experimentales.

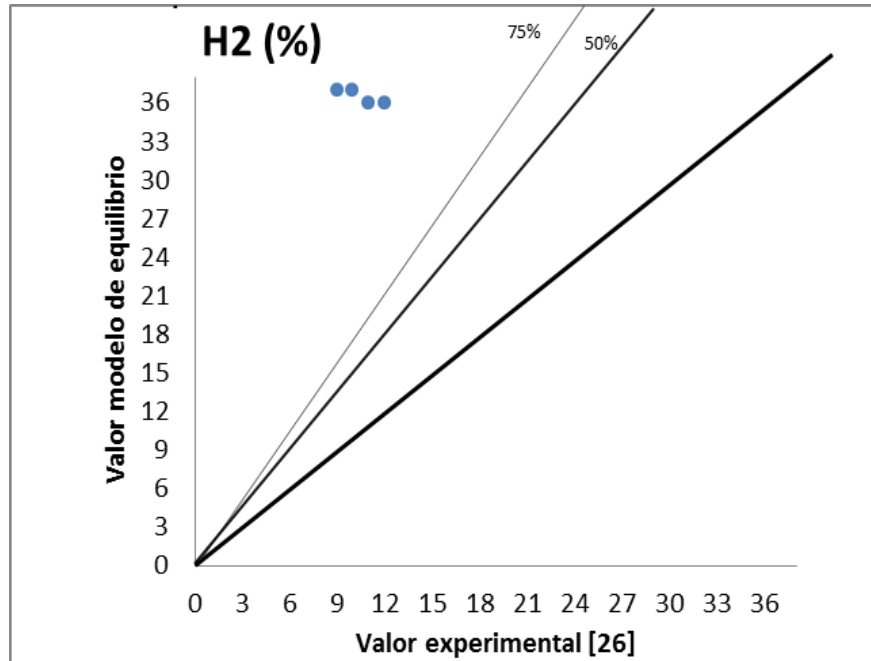


Figura 35. Composición de H₂ calculado por el modelo de equilibrio frente a la composición de H₂ experimental para las mismas condiciones de operación.

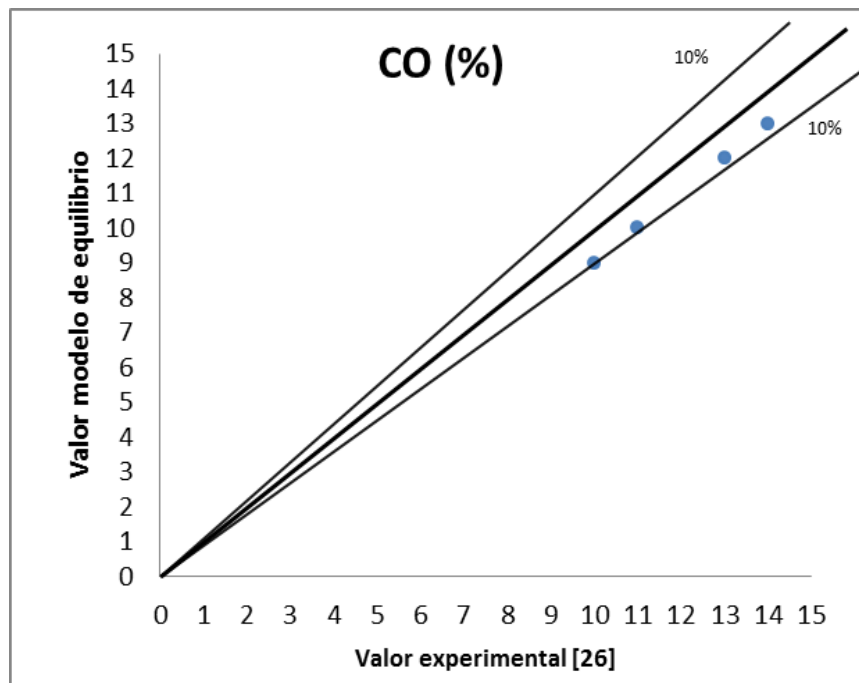


Figura 36. Composición de CO calculado por el modelo de equilibrio frente a la composición de CO experimental para las mismas condiciones de operación.

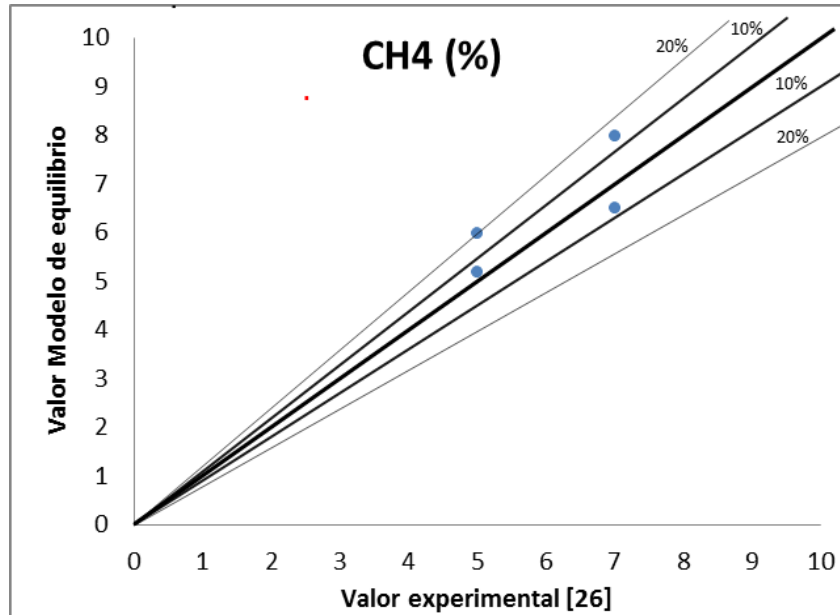


Figura 37. Composición de CH_4 calculado por el modelo de equilibrio frente a la composición de CH_4 experimental para las mismas condiciones de operación.

Por otro lado, de acuerdo al modelo cinético, en lo que a la composición de gases de síntesis respecta, comparando órdenes de magnitud de los resultados de las simulaciones con respecto a los resultados experimentales, se puede apreciar la similitud en la composición de CO , H_2 con un error alrededor del 5% para el caso del H_2 como se observa en la *figura 38* (al contrario que sucedía para el modelo cinético) y un error entre el 5% y 20% para el CO como se aprecia en la *figura 39*. Sin embargo, los resultados de composición de CH_4 arrojados por el modelo cinético son muy bajos con respecto los resultados experimentales como se observa en la *figura 40*, posiblemente, debido al cálculo de una baja velocidad de reacción de las reacciones que producen de CH_4 como $R2$ (*hydrogasificación*) y $R3$, o también, debido al cálculo de una alta velocidad de reacción de la reacción de combustión del metano ($R6$).

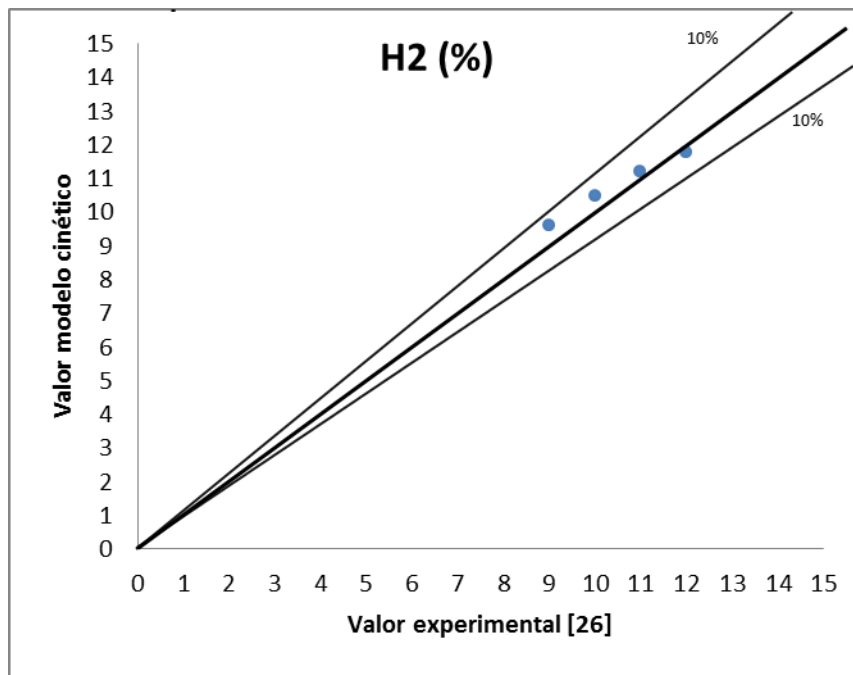


Figura 38. Composición de H_2 calculado por el modelo cinético frente a la composición de H_2 experimental para las mismas condiciones de operación.

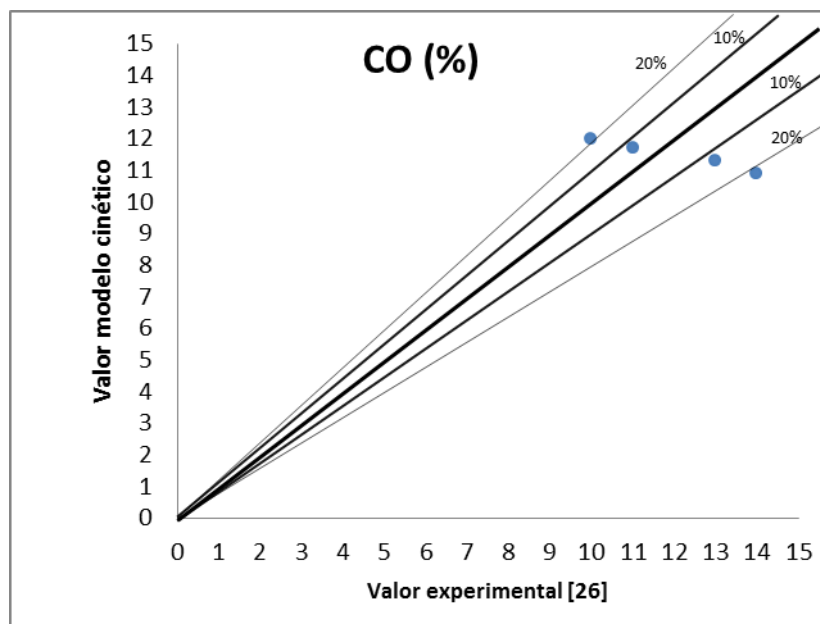


Figura 39. Composición de CO calculado por el modelo cinético frente a la composición de CO experimental para las mismas condiciones de operación.

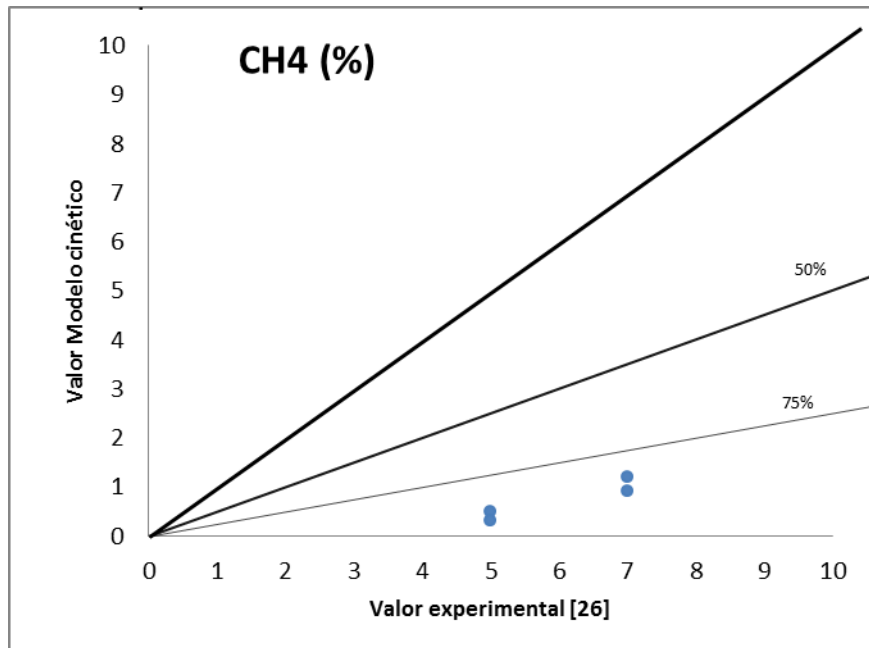


Figura 40. Composición de CH₄ calculado por el modelo cinético frente a la composición de CH₄ experimental para las mismas condiciones de operación.

Luego, se sigue que de acuerdo al modelo de equilibrio, en la *figura 41* se aprecia como los resultados de conversión de char de las simulaciones no entran dentro de los rangos típicos de eficiencia en la conversión (60-90%) [12], presentando errores algo mayores del 25% con respecto a los experimentales. Estos valores son inferiores a los resultados esperados en un proceso típico de gasificación de biomasa, pero al estar el modelo basado en los parámetros termodinámicos, la conversión obtenida puede considerarse elevada, y por lo tanto, es de esperar que tampoco coincidan.

Para concluir, como era de esperar los valores PCI obtenidos de acuerdo al modelo de equilibrio, son algo superiores con respecto a los resultados experimentales debido a la alta composición de H₂ obtenido (ver *figura 42*), puesto que el CH₄ y CO presentan valores de composición muy similares a los experimentales. No obstante, los valores de PCI están dentro de los valores típicos que se obtienen experimentalmente en procesos de gasificación de biomasa: 4-7 MJ/Nm³ [19].

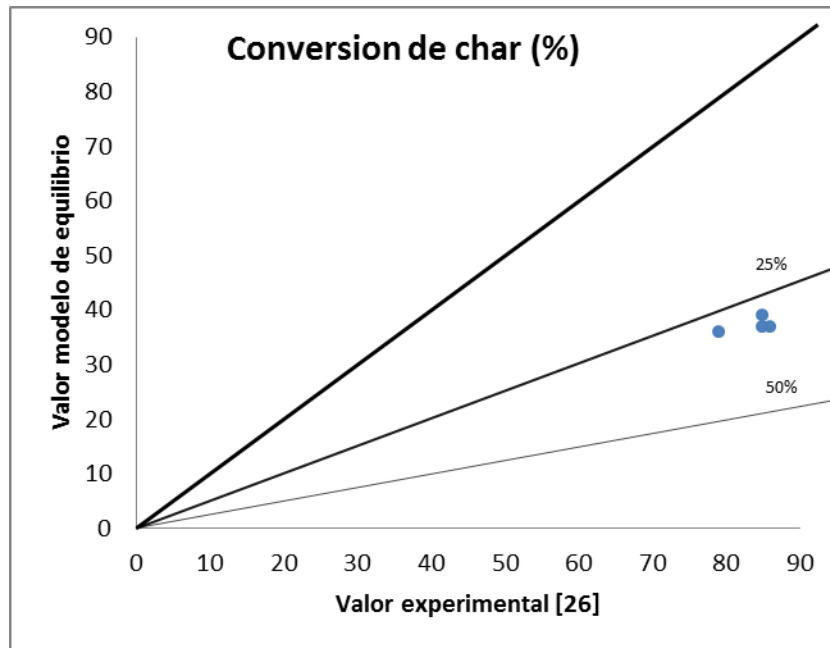


Figura 41. Conversión de char calculado por el modelo de equilibrio frente a la conversión de char experimental para mismas condiciones de operación.

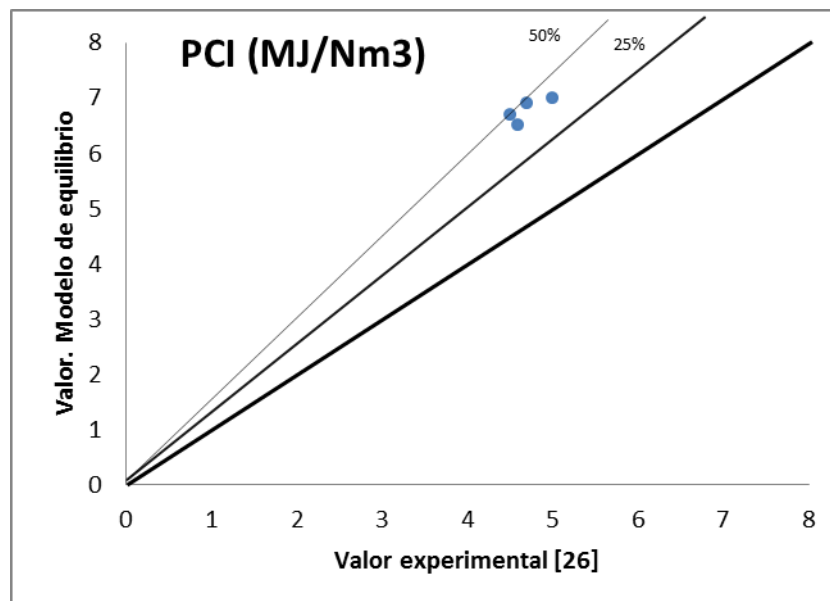


Figura 42. PCI calculado por el modelo de equilibrio frente al PCI experimental para mismas condiciones de operación.

Finalmente, de acuerdo al modelo cinético, los resultados de eficiencia en la conversión de char de las simulaciones entran dentro de los rangos típicos de conversión (60-90%) [12] como se observa en la *figura 43*. Los resultados difieren en menos de un 5% con respecto a los experimentales ya que este modelo si que tiene en cuenta mecanismos de conversión de char y por tanto se han tenido en cuenta reacciones como la combustión del carbono al contrario que en el modelo de equilibrio, en donde no se ha tenido en cuenta dicha reacción al estar basado en parámetros termodinámicos.

Para concluir, de acuerdo al modelo cinético, el PCI obtenido en todas las simulaciones es inferior a los valores típicos que se obtienen experimentalmente en procesos de gasificación de biomasa (4-7 MJ/Nm³) [19] como se observa en la *figura 43*, posiblemente, por culpa de la baja composición de CH₄ obtenido en las simulaciones, puesto que la composición de H₂ y CO están más cerca de sus rangos normales en las instalaciones experimentales.

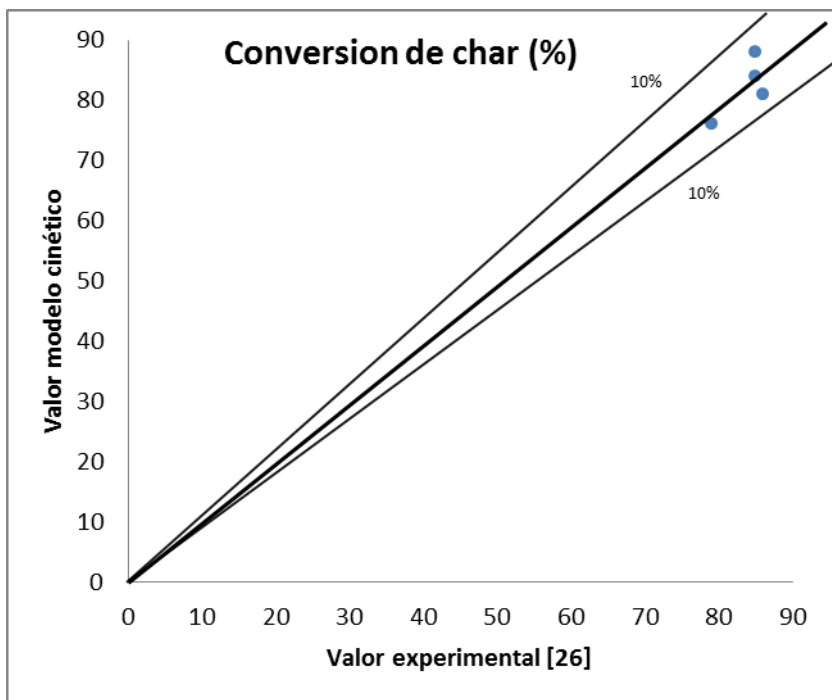


Figura 43. Conversión de char calculado por el modelo cinético frente a la conversión de char experimental para mismas condiciones de operación.

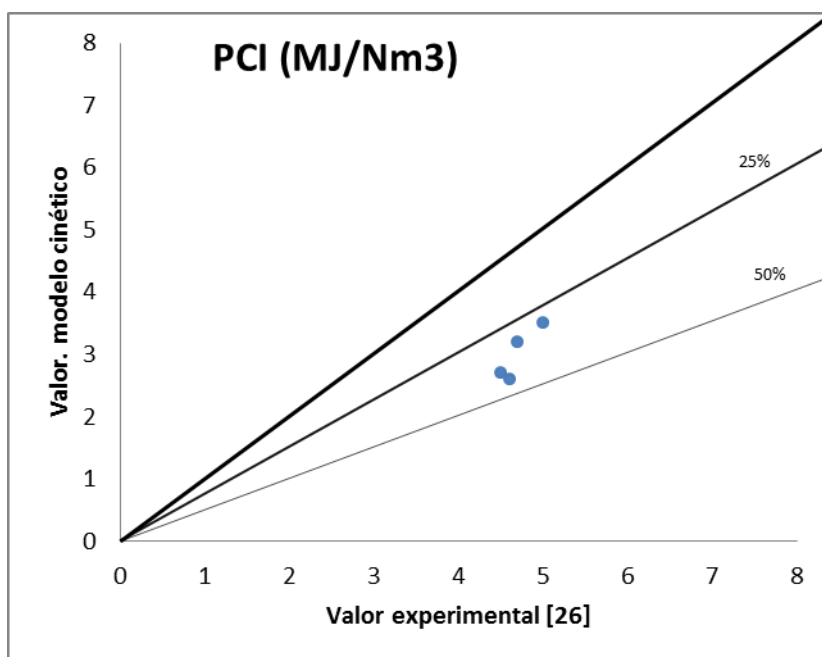


Figura 44. PCI calculado por el modelo cinético frente al PCI experimental para mismas condiciones de operación.

4.2.2 Estudio de simulaciones de casos particulares

A continuación se muestran los resultados de las simulaciones de tres casos particulares del modelo de equilibrio con el fin de hacer un análisis mas profundo del modelo, ver *tablas 17, 18, 19*.

T=800°C	ER=0,25					
Composición del gas de síntesis a la salida del lecho (%).Base seca						
H ₂	N ₂	O ₂	CO	CO ₂	H ₂ O	CH ₄
38,58	27,06	0	12,65	16,45	0	5,26
Conversión de biomasa (%)				PCI (MJ/Nm3)		
37,5				7,01		

Tabla 17. Resultados de la simulación del modelo de equilibrio.

T=800°C		ER=0,30				
Composición del gas de síntesis a la salida del lecho (%).Base seca						
H ₂	N ₂	O ₂	CO	CO ₂	H ₂ O	CH ₄
35,98	30,75	0	10,15	17,86	0	5,26
Conversión de biomasa (%)				PCI (MJ/Nm3)		
39				6.47		

Tabla 18. Resultados de la simulación del modelo de equilibrio.

T=750°C	ER=0,25					
Composición del gas de síntesis a la salida del lecho (%).Base seca						
H ₂	N ₂	O ₂	CO	CO ₂	H ₂ O	CH ₄
34,63	29,03	0	6,25	21,56	0	8,52
Conversión de biomasa (%)				PCI (MJ/Nm3)		
36.62				6.95		

Tabla 19. Resultados de la simulación del modelo de equilibrio.

Comentarios:

Para empezar, se puede observar a simple vista en las tablas de los resultados de las simulaciones que se produce el agotamiento del O₂, característica que presenta un proceso de gasificación típico a escala comercial. En líneas generales, comparando órdenes de magnitud de los resultados de las simulaciones con los resultados experimentales, se puede apreciar un valor alto en la composición de H₂ y una similitud en la composición de CO y CH₄ de la misma manera que se ha observado anteriormente en las gráficas comparativas de órdenes de magnitud.

Por otro lado, se puede observar en los resultados de la *tabla 19*, la obtención de una baja composición de CO y alta composición de CH₄ al realizar una simulación a baja temperatura, de la misma manera tal y como muestra la experimentación [25]: las reacciones que producen CO suceden en menor medida que las que producen CH₄ a bajas temperaturas de gasificación. Por lo tanto, una posible causa de la obtención de una baja

composición de CO a baja temperatura, puede ser debido a que la reacción de *hydrogasificación*, la cual produce CH₄, se sucede en mayor medida que la reacción de *boudouard*, la cual produce CO.

Un rasgo característico de la oxidación parcial es la obtención de una conversión de biomasa menor del 100%. El resultado de las simulaciones no entra dentro de los rangos típicos de eficiencia en la conversión (60-90%) [12] de la misma manera que se ha observado antes en las gráficas de comparación de ordenes de magnitud.

Como ya se ha comentado anteriormente, el PCI obtenido es algo superior con respecto a los resultados experimentales debido a la alta composición de H₂ obtenido, puesto que el CH₄ y CO presentan valores de composición muy similares a los experimentales. No obstante, los valores de PCI están dentro de los valores típicos que se obtienen experimentalmente en procesos de gasificación de biomasa: 4-7 MJ/Nm³ [19].

A continuación se muestran los resultados de las simulaciones de cuatro casos particulares del modelo cinético con el fin de hacer un análisis más profundo del modelo, ver *tablas 20, 21, 22, y 23*.

T=800°C	ER=0,25	u ₀ /umf=1,2				
Composición del gas de síntesis a la salida del lecho (%)						
H ₂	N ₂	O ₂	CO	CO ₂	H ₂ O	CH ₄
11,56	55,94	0	13,91	17,34	0	1,25
Conversión de biomasa (%)				PCI (MJ/Nm3)		
68,06				3,17		

Tabla 20. Resultados de la simulación del modelo cinético.

T=900°C	ER=0,30	u ₀ /umf=1,2				
Composición del gas de síntesis a la salida del lecho (%)						
H ₂	N ₂	O ₂	CO	CO ₂	H ₂ O	CH ₄
8,92	56,31	0	12,47	22,04	0	0,23
Conversión de biomasa (%)				PCI (MJ/Nm3)		
96.29				2.41		

Tabla 21. Resultados de la simulación del modelo cinético.

T=800°C	ER=0,35	u ₀ /umf=1,2				
Composición del gas de síntesis a la salida del lecho (%)						
H ₂	N ₂	O ₂	CO	CO ₂	H ₂ O	CH ₄
8,5	59,72	0	13,38	17,98	0	0,053
Conversión de biomasa (%)				PCI (MJ/Nm3)		
94,92				2,45		

Tabla 22. Resultados de la simulación del modelo cinético.

T=800 °C	ER=0,25	u ₀ /umf=6				
Composición del gas de síntesis a la salida del lecho (%)						
H ₂	N ₂	O ₂	CO	CO ₂	H ₂ O	CH ₄
3,48	77,23	0	5,97	13,33	0	0,00
Conversión de biomasa (%)				PCI (MJ/Nm3)		
24.86				1.04		

Tabla 23. Resultados de la simulación del modelo cinético.

Comentarios:

En primer lugar, se observa en las tablas de los resultados de las simulaciones que se produce el agotamiento del O₂, característica que presenta un proceso de gasificación típico a escala comercial. En segundo lugar, en líneas generales, comparando órdenes de magnitud de los resultados de la simulación con las *tablas 11, 12 y 13* [20] [22] [26], se puede apreciar la similitud de estos, difiriendo menos de un 10% la composición de CO, H₂ de la misma manera que se ha observado antes en las gráficas de comparación de órdenes de magnitud. Por otro lado, se puede observar en los resultados de la *tabla 23* la obtención de una baja composición de los gases de síntesis al realizar una simulación para alto valor del estado de fluidización (u_0/u_{mf}), de la misma manera tal y como muestra la experimentación [25], en donde un aumento de la velocidad superficial del gas disminuye el tiempo de residencia, de tal manera que las reacciones heterogéneas de gasificación de biomasa se suceden en menor medida, produciendo menor cantidad de gas de síntesis, y en consecuencia, menor conversión de biomasa.

Después, un rasgo característico de la oxidación parcial es la obtención de una conversión de biomasa menor del 100%. Los resultados de las simulaciones entran dentro de los rangos típicos de eficiencia en la conversión (60-90%) [12], excepto para la *tabla 23*, puesto que un aumento de la velocidad superficial del gas disminuye el tiempo de residencia, disminuyendo el grado de conversión de biomasa [25].

Por último, el PCI obtenido en todas las simulaciones es inferior a los rangos típicos comentados anteriormente, posiblemente, por culpa de la baja composición de CH₄ como ya se ha visto anteriormente en las gráficas de comparación de órdenes de magnitud, puesto que la composición de H₂ y CO están más cerca de sus rangos normales en las instalaciones experimentales.

A continuación, La *figura 45* muestra la composición de los compuestos que conforman el gas de síntesis a lo largo del lecho fluidizado. El motivo de representar la

gráfica de composiciones es dar una idea de los órdenes de magnitud que representa cada componente en términos de perfiles axiales, y así conocer la variación de la composición a lo largo de la altura del reactor. Los resultados indican una mayor influencia de las reacciones donde el O_2 actúa como reactante, puesto que inicialmente se produce una variación brusca en la composición hasta que se agota por completo. Se puede observar una vez agotado el O_2 una leve variación proporcional de CO , CO_2 , H_2 , e inversamente proporcional de CH_4 al variar la altura, a consecuencia de que las reacciones de gasificación de la biomasa (heterogéneas), la reacción de *wáter-gas-shift* (R7) y la de *Steam reforming* (R9), al tener una cinética lenta, son las que únicamente influyen en pequeñas variaciones en la composición del gas de síntesis.

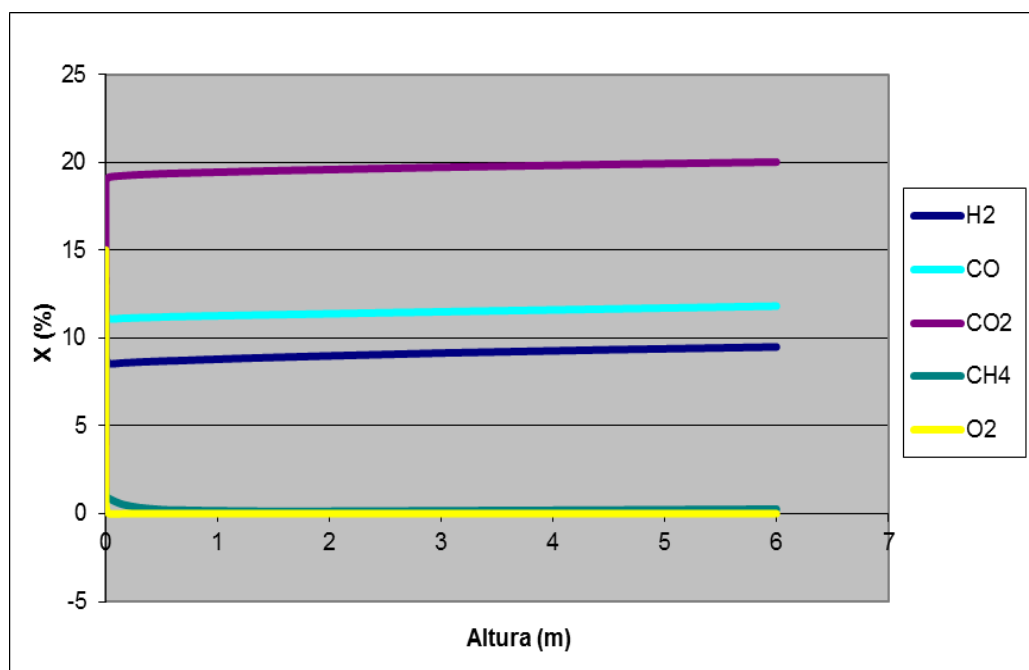


Figura 45. Evolución la composición de los gases de síntesis con la altura de lecho.

4.3 Análisis de sensibilidad

4.3.1 Análisis de sensibilidad. Modelo de equilibrio

Las condiciones de simulación vienen dadas por las *tablas 10 y 15*, variando en cada caso el parámetro de sensibilidad que aplica. La *tabla 24* muestra un resumen de los rangos de operación de las variables estudiadas en nuestro análisis de sensibilidad del modelo de equilibrio. Es importante decir que para realizar el análisis de sensibilidad de una variable se debe dejar como constante la otra variable.

Parámetro de sensibilidad	Rango de variación
Temperatura (°C)	750 - 900
Equivalence Ratio (-)	$0,25 \leq ER \leq 0,35$

Tabla 24. Rangos valores de operación (T, ER) adoptados para los análisis de sensibilidad del modelo de equilibrio.

De la misma manera que sucedía en el análisis comparativo de resultados, dado el volumen inmanejable de gráficas, se mostrarán aquellas de casos representativos.

Temperatura

Para la realización del análisis de sensibilidad de la temperatura se tiene que dejar como constante el término del dosado. Primero, para empezar el análisis de sensibilidad de la temperatura, las gráficas que se analizan y se muestran a continuación son a $ER=0,25$.

Para empezar, se observa que los resultados obtenidos en el análisis de sensibilidad son muy similares a las estimaciones expuestas en el *apartado 4.1.4*, observando en la *figura 46* un crecimiento de CO y H_2 y un descenso de CH_4 (productos típicos de gasificación) con la temperatura en los rangos de operación ($750-900^{\circ}C$).

Previsiblemente, la *figura 47* muestra un crecimiento de la conversión de biomasa desde los $750^{\circ}C$ a los $900^{\circ}C$. El resultado de la conversión de biomasa no entra dentro de los rangos típicos de eficiencia en la conversión (60-90%) [12]. Como se ha comentado en el anterior *apartado 4.2.1* la respuesta está en modelo de equilibrio implementado, basado en parámetros termodinámicos, sin tener en cuenta mecanismos cinéticos de conversión del biomasa, por lo que no se han incorporado reacciones como la combustión del carbón la cual aumentaría el grado de conversión de biomasa. Finalmente, La *figura 48* muestra el crecimiento del PCI con la temperatura, obteniendo su máximo a la temperatura más alta de gasificación ($900^{\circ}C$).

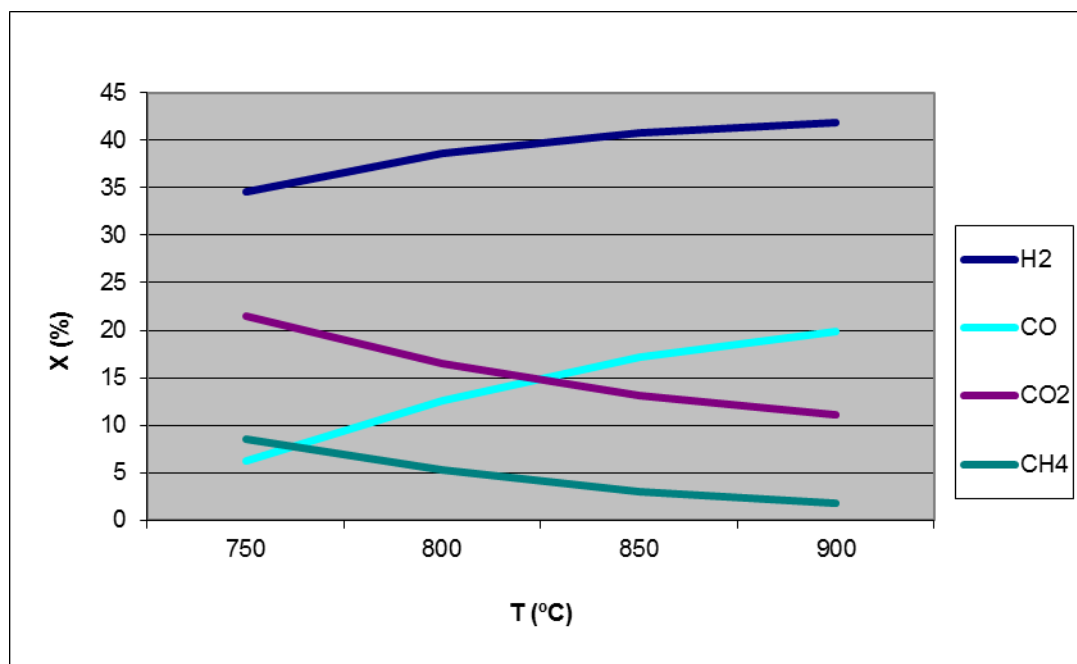


Figura 46. Evolución de la composición de los gases de síntesis a la salida del lecho con la temperatura para $ER=0,25$.

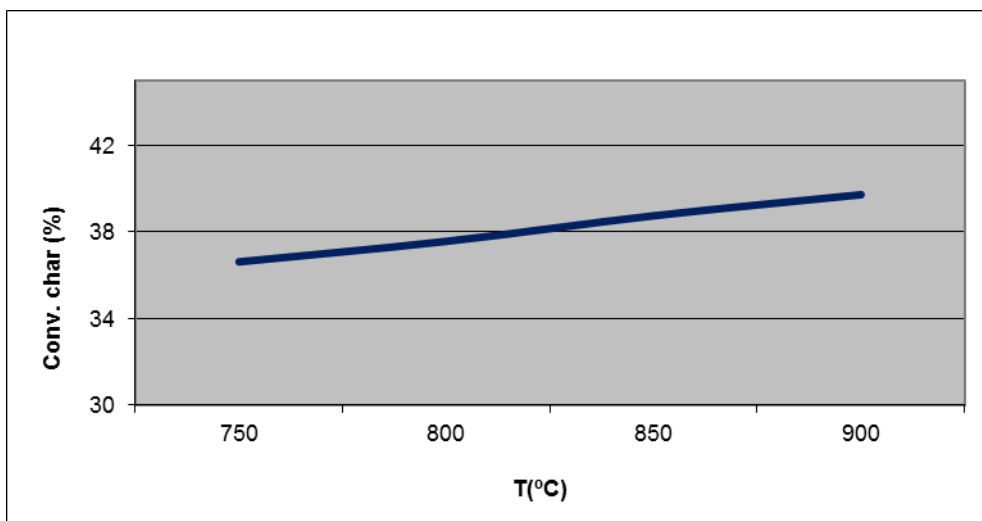


Figura 47. Evolución de la conversión de biomasa con la temperatura para ER=0,25.

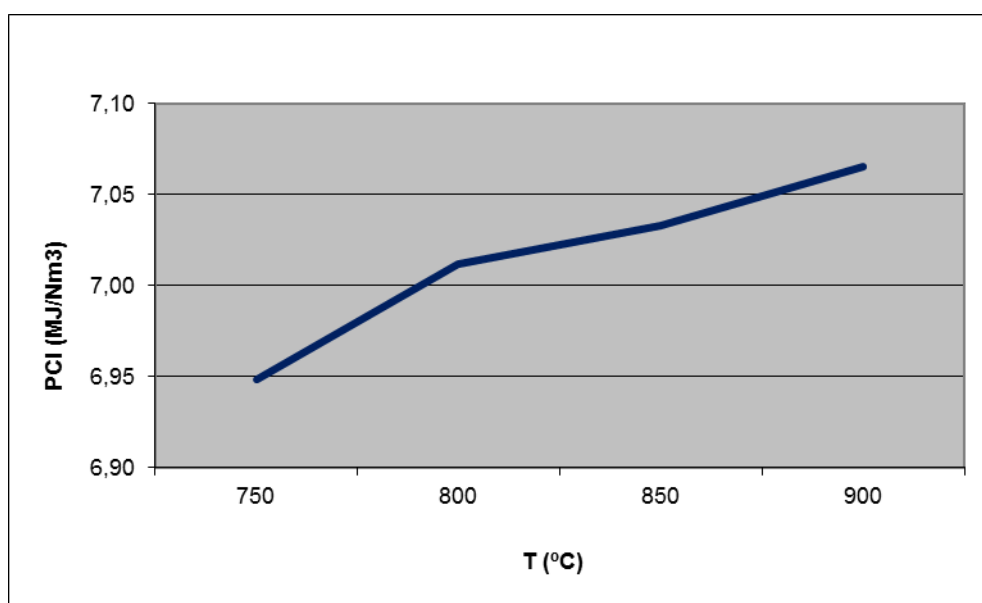


Figura 48. Evolución del PCI con la temperatura para ER=0.25.

Al principio de este análisis, se ha dejado claro que para poder realizar el análisis de sensibilidad de la temperatura se tenía que dejar constante el término del dosado, fijándose en ER=0,25. A continuación, para seguir con el análisis de sensibilidad de la temperatura, se tratará de ver qué sucede para ER=0,30 y ER=0,35 a fin de poder llegar a conclusiones más profundas.

Para empezar, se observa en las *figuras 49 y 50* que las tendencias de los resultados obtenidos para ER=0,3 y ER=0,35 son iguales que las tendencias de los resultados obtenidos para ER=0,25 en cuanto a composición de gas se refiere, de tal manera que se sucede un crecimiento de CO y H₂ y un descenso de CH₄ (productos típicos de gasificación) con la temperatura en los rangos de operación (750-900°C). Además, en las figuras mencionadas junto con la *figura 46*, se observa como la producción de CH₄ es

mayor que la de CO a bajas temperaturas de gasificación, debido a que las reacciones que producen CH_4 como la de *hydrogasificación*, se suceden en mayor medida que las que producen CO a baja temperatura. Sin embargo, a medida que crece la temperatura, las reacciones que favorecen en la producción de CO prevalecen sobre las que producen CH_4 , de la misma manera tal y como muestra la experimentación [25].

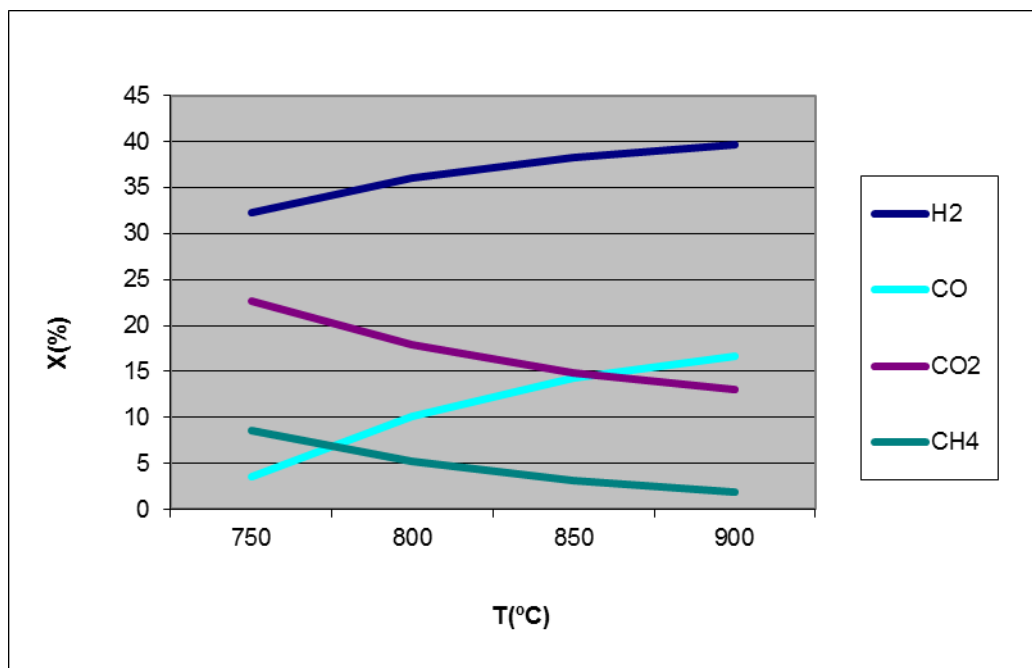


Figura 49. Evolución de la composición de los gases de síntesis a la salida del lecho con la temperatura para ER=0,30.

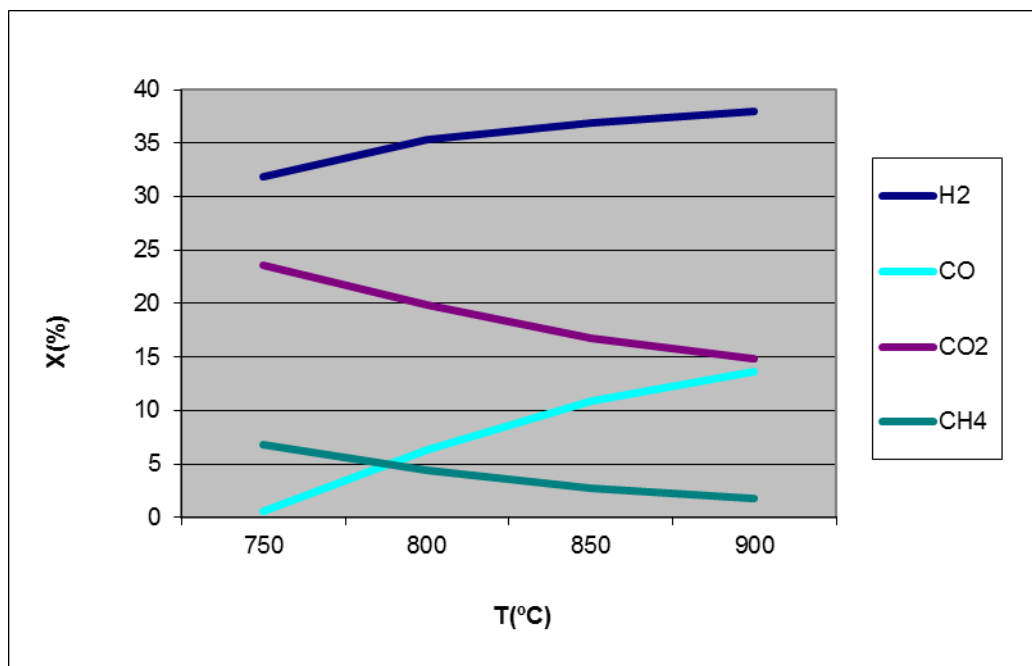


Figura 50. Evolución de la composición de los gases de síntesis a la salida del lecho con la temperatura para ER=0,35.

Después, la *figura 51* muestra un crecimiento de la conversión de biomasa desde los 750°C a los 900°C para $ER=0,3$ y $ER=0,35$ de la misma manera tal y como muestra la curva para $ER=0,25$. Los resultados de la conversión de biomasa para estos valores de dosado tampoco entran dentro de los rangos típicos de eficiencia en la conversión (60-90%) [12]. También, en la *figura 51*, se puede observar como para el rango de temperaturas comprendido entre 750°C y 825°C la curva de conversión de biomasa para $ER=0,25$ tiene por encima la curva para $ER=0,30$ y a su vez por debajo la curva para $ER=0,35$, dejando intuir un óptimo de dosado en torno al valor de $ER=0,30$, tal y como muestra la *figura 34* obtenida experimentalmente. Sin embargo, en el rango de temperaturas comprendido entre 825°C y 900°C, las tres curvas tienden a agruparse debido a la mayor conversión de biomasa que se produce a altas temperaturas de gasificación, superando la curva de $ER=0,35$ a la de $ER=0,25$ en dicho rango, e incluso la curva para $ER=0,30$ a 900°C. Además, también en la *figura 51*, se observa como a baja temperatura la conversión de biomasa para $ER=0,35$ es menor que para $ER=0,3$ y $ER=0,25$, puesto que la mayor presencia de oxígeno favorece las reacciones de combustión de los gases de síntesis en detrimento de las reacciones de gasificación de la biomasa. Por lo tanto, de acuerdo a nuestro modelo de equilibrio, para altos valores de temperatura y dosado se favorecen las reacciones de conversión de la biomasa, superando la curva de $ER=0,35$ a la curva de $ER=0,25$ en torno a 825°C y la curva de $ER=0,3$ a 900°C (límite de la gasificación), mientras que para bajos valores de temperatura y un valor bajo de dosado no se favorecen las reacciones de conversión de la biomasa, en consecuencia, la curva para $ER=0,35$ tiene una mayor pendiente que las demás curvas para $ER=0,25$ y $ER=0,30$; por lo tanto, la conversión de biomasa es más sensible a variaciones de temperatura para $ER=0,35$.

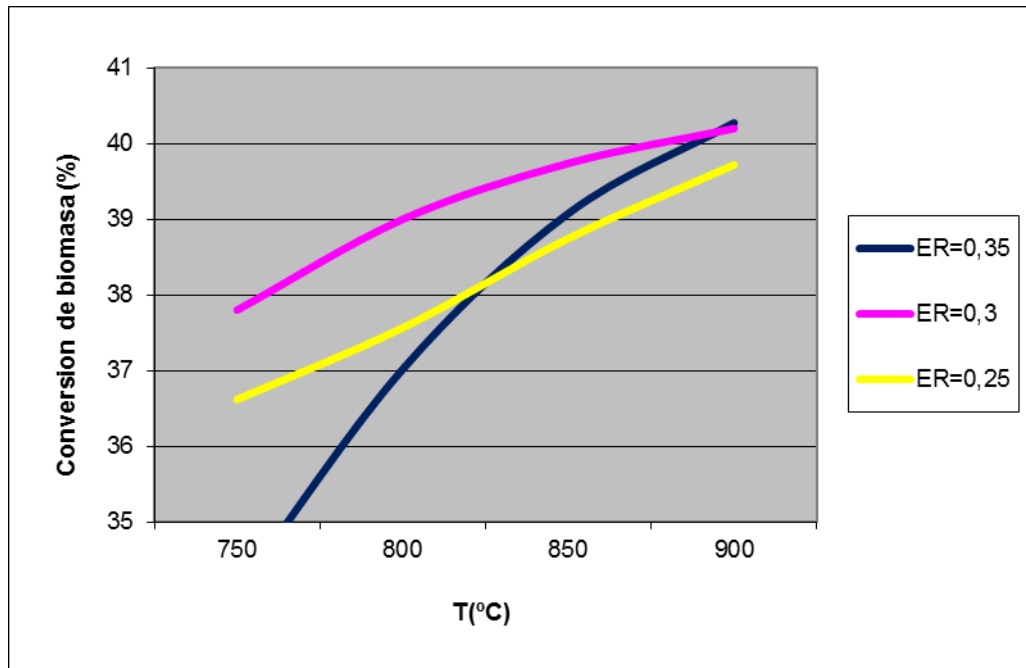


Figura 51. Evolución de la conversión de biomasa con la temperatura para distintos dosados.

Por último, La *figura 52* muestra el crecimiento del PCI con la temperatura para $ER=0,30$ y $ER=0,35$, obteniendo también sus máximos a la temperatura más alta de gasificación (900°C), de la misma manera tal y como sucede para $ER=0,25$. Por lo tanto, de acuerdo al modelo de equilibrio, esta temperatura se puede considerar un óptimo, puesto que se obtiene la composición más favorable de gas de síntesis para cualquier valor del dosado. Además, también en dicha gráfica, se observa que a $ER=0,25$ se obtendría el máximo de energía de quemar el gas de síntesis, por lo tanto, $T=900^{\circ}\text{C}$ y $ER=0,25$ se pueden considerar condiciones de operación óptimas desde este punto de vista. También, en la *figura 52* se puede observar como el PCI es más sensible a la temperatura para $ER=0,35$, a consecuencia de la menor obtención de gases combustibles en el gas de síntesis para $ER=0,35$ a baja temperatura y la mayor conversión de biomasa a altas temperaturas para alto valor de dosado.

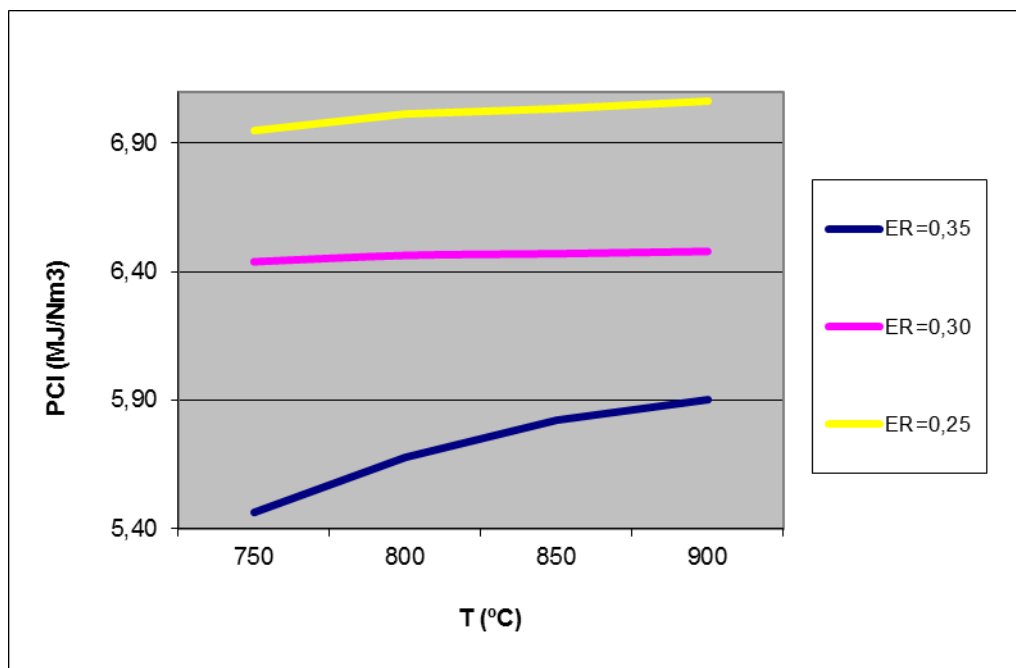


Figura 52. Evolución del PCI con la temperatura para distintos dosados.

Equivalence ratio (dosado)

Para la realización del análisis de sensibilidad del dosado se tiene que dejar como constante el término de la temperatura. En este caso, también para comenzar el análisis de sensibilidad del dosado, las gráficas que se analizan y se muestran a continuación son a 800°C.

Para empezar, el significado de aumentar el dosado es hacer que las reacciones de combustión se sucedan en mayor medida que las de gasificación, en consecuencia, el contenido en CO₂ aumenta, mientras disminuyen el contenido en H₂, CO y CH₄ como muestra la *figura 53*.

La *figura 34* expuesta en el apartado 4.1.4, muestra que en la práctica se produce un aumento del grado de conversión de biomasa con respecto al dosado, llegando a un óptimo en torno a 0,26. La *figura 54* obtenida de los resultados de las simulaciones, muestra una tendencia similar a la *figura 34*, dejando intuir también un óptimo en torno al rango de valores comprendidos entre 0,25 y 0,30. Esto mismo ya se observaba anteriormente en el análisis de sensibilidad de la temperatura en el rango comprendido entre 750°C y 825°C para distintos valores de dosado.

Como era previsible, La *figura 55* muestra el decrecimiento del PCI con respecto al dosado, debido también al decrecimiento en la obtención de gases de síntesis.

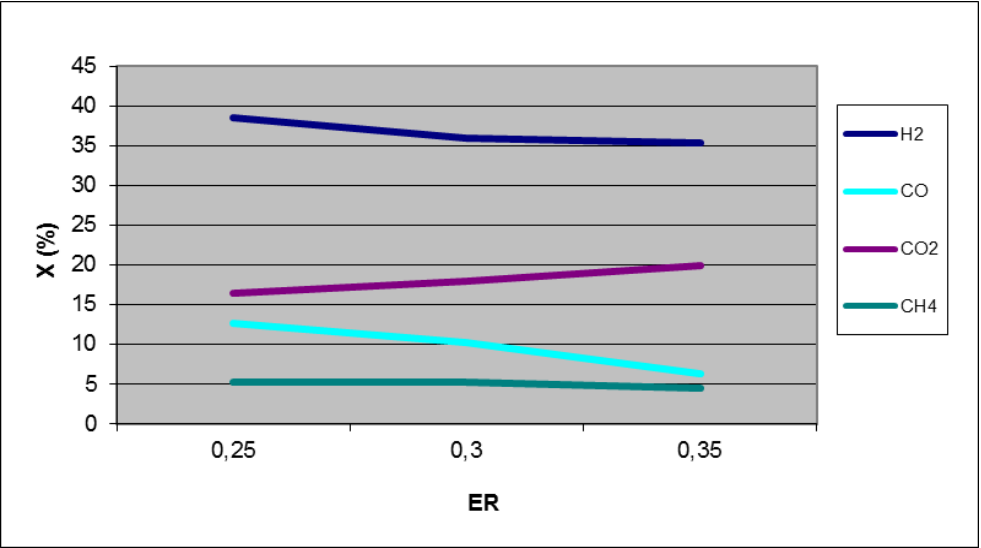


Figura 53. Evolución de la composición de los gases de síntesis a la salida del lecho con respecto el dosado para T=800°C.

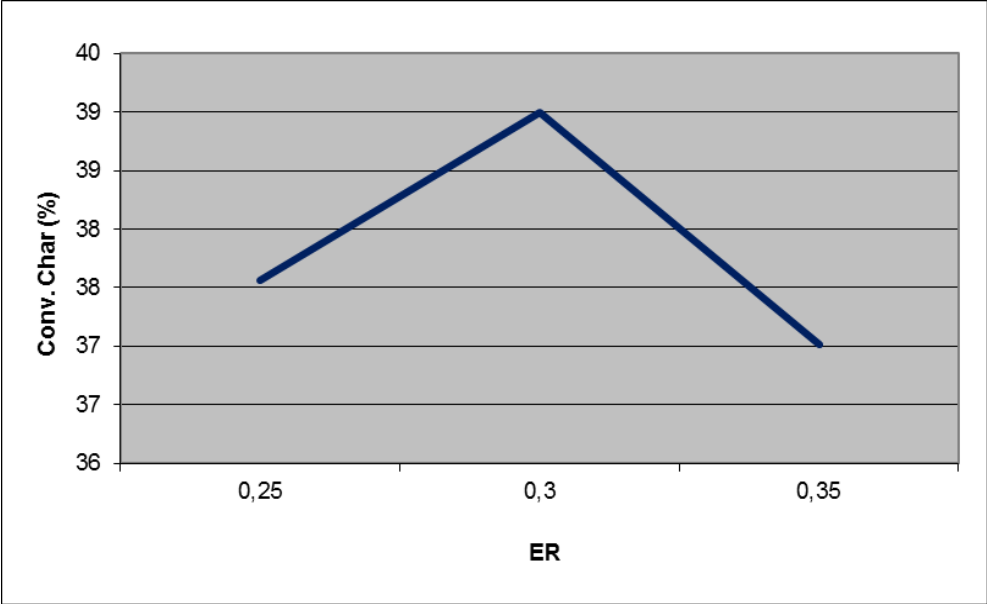


Figura 54. Evolución de la conversión de biomasa con respecto el dosado para T=800°C

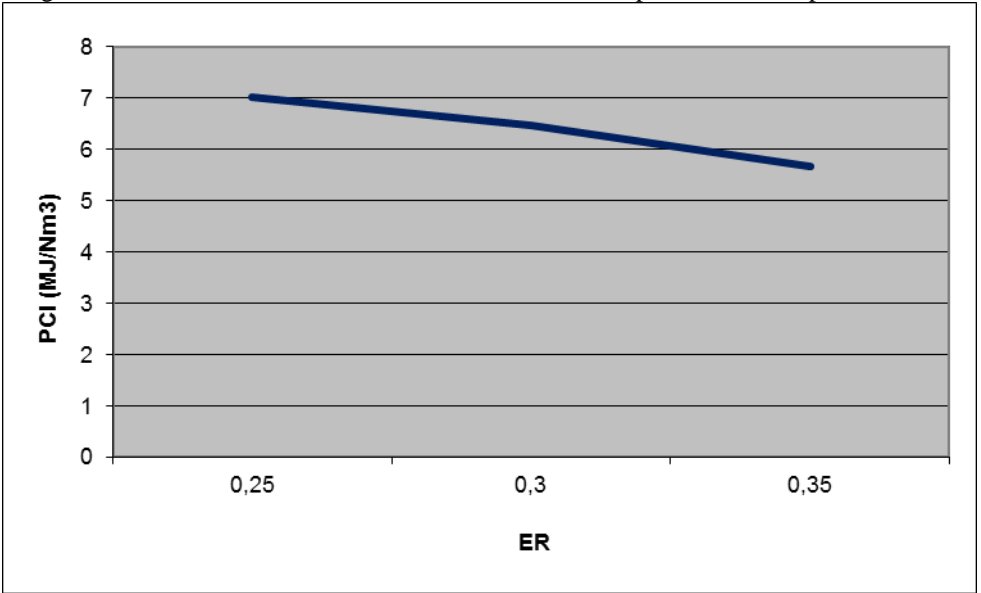


Figura 55. Evolución del PCI con respecto el dosado para T=800°C

Al comienzo este análisis de sensibilidad del *Equivalence Ratio* (dosado), se ha dejado claro que para poder realizar dicho análisis se tenía que dejar constante el término de la temperatura, fijándose en 800°C. A continuación, para seguir con el análisis de sensibilidad del dosado, se tratará de ver qué sucede para distintas temperaturas con el objetivo de poder profundizar en el estudio.

En primer lugar, en cuanto a composición de gas se refiere, se observa en las *figuras 56* y *57* que las tendencias de los resultados obtenidos para las distintas temperaturas son muy similares. Como se ha comentado anteriormente, aumentar el dosado es hacer que las reacciones de combustión se den en mayor medida que las de gasificación, de tal manera que el contenido en CO₂ aumenta, mientras disminuyen el contenido en H₂, CO y CH₄ como muestran las *figuras 56* y *55*. Por otro lado, en la *figura 56* se puede observar también mas claramente lo comentado anteriormente en el análisis de sensibilidad de la temperatura, como a T=750°C la producción de CH₄ es mayor que la de CO en todo el rango de valores de dosado (0,25-0,35), esto es consecuencia de que las reacciones que producen CH₄ como la de *hydrogasificación* se suceden en mayor medida que las que producen CO a baja temperatura. Por el contrario, en la *figuras 56* y *57* se observa que a mayor temperatura, las reacciones que favorecen en incremento de CO prevalecen sobre las que producen CH₄, de la misma manera tal y como muestra la experimentación [25].

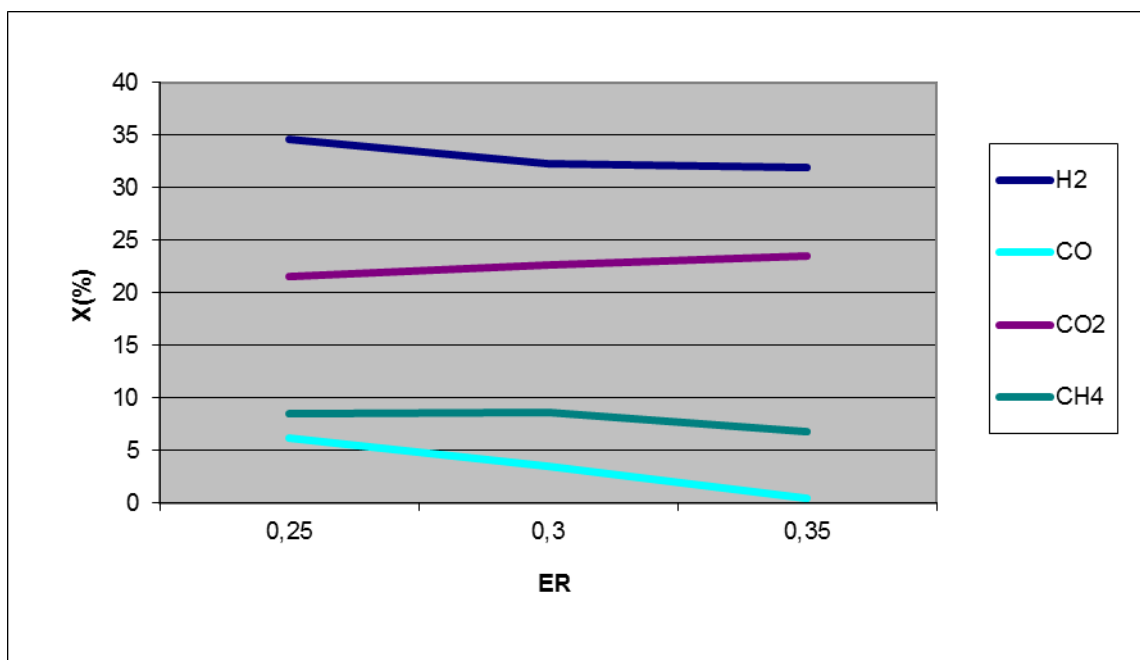


Figura 56. Evolución de la composición de los gases de síntesis a la salida del lecho con respecto el dosado. T=750°C.

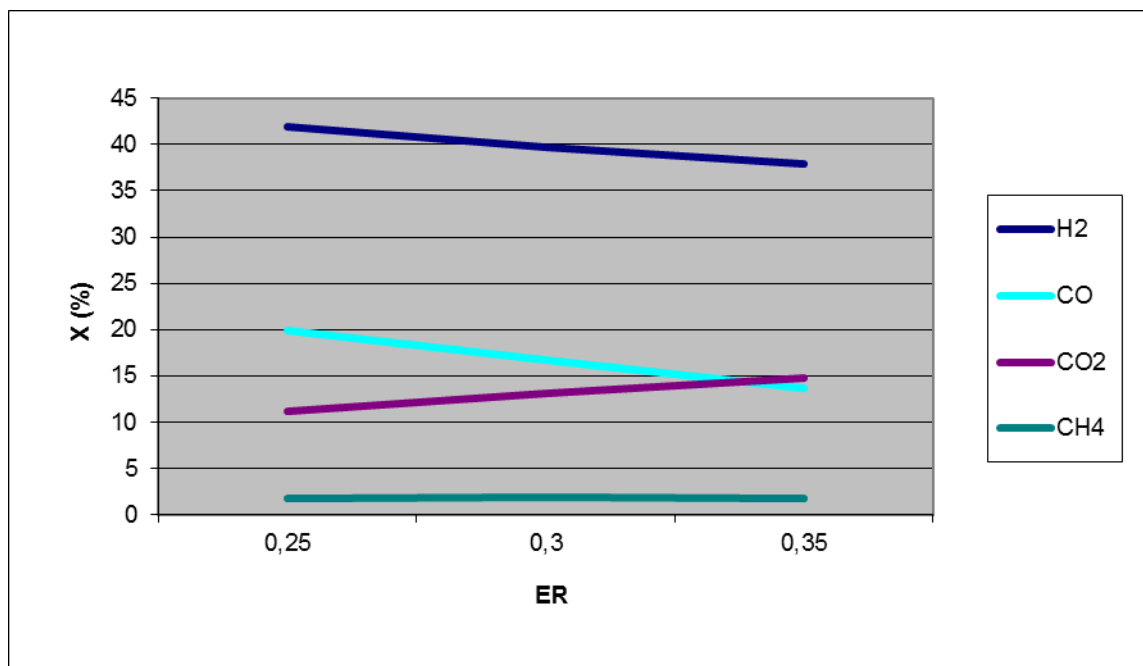


Figura 57. Evolución de la composición de los gases de síntesis a la salida del lecho con respecto el dosado. $T=900^{\circ}\text{C}$.

En segundo lugar, la *figura 58* muestra también que para distintas temperaturas de gasificación se intuye un óptimo en torno al rango de valores comprendidos entre 0,25 y 0,30, excepto para 900°C , donde la curva de conversión de biomasa es prácticamente plana, de tal manera que se tienen valores muy similares de conversión de biomasa para todo el rango de dosado (0,25-0,30). De acuerdo a nuestro modelo de equilibrio, se favorecen las reacciones de conversión de biomasa a altas temperaturas, de la misma manera tal y como sucede en la experimentación.

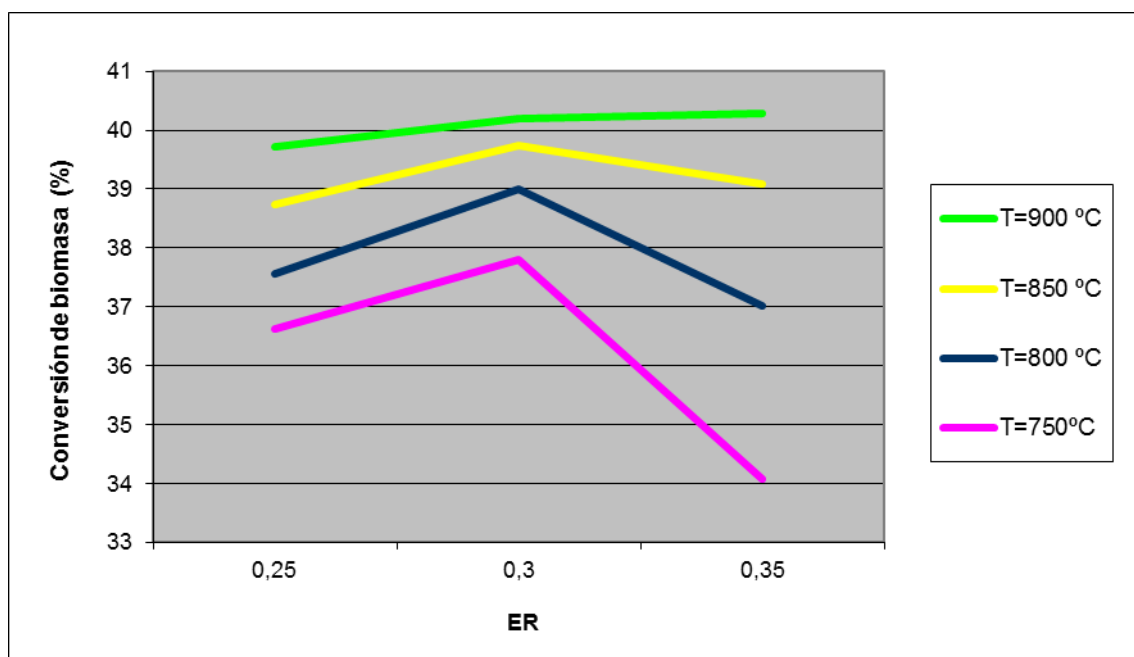


Figura 58. Evolución de la conversión de biomasa con respecto el dosado para distintas temperaturas.

Finalmente, como era de esperar, La *figura 59* muestra el decrecimiento del PCI con respecto el dosado para cualquier temperatura como ya hemos se ha visto que sucedía para 800°C, debido también al decrecimiento en la obtención de gases de síntesis. Por lo tanto, todo parece indicar que existirán determinadas condiciones de operación en las que se optimice el proceso, obteniendo la mayor cantidad posible de gas de síntesis para una alta conversión de biomasa.

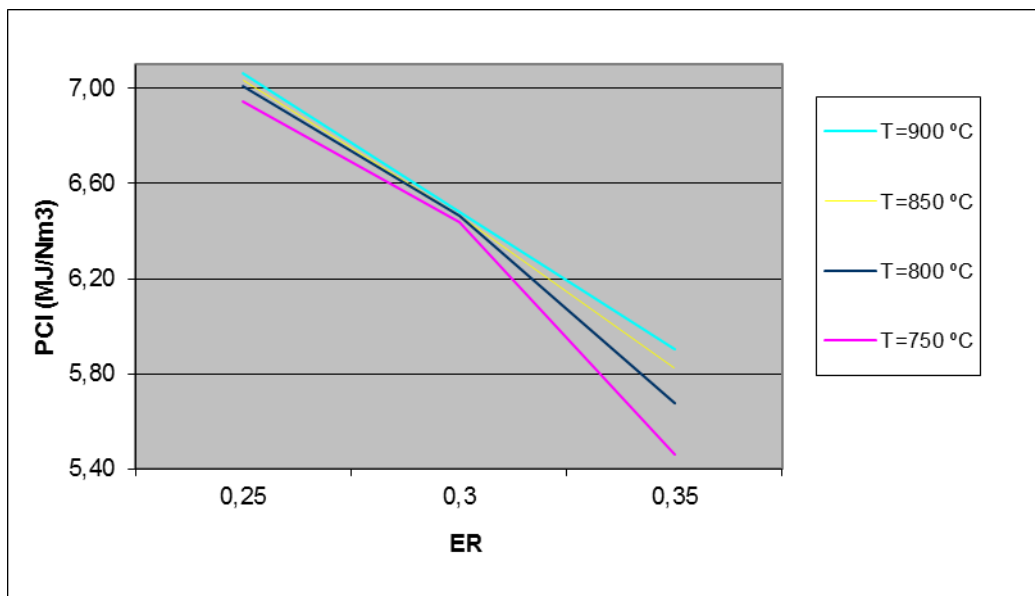


Figura 59. Evolución del PCI con respecto el ER para distintas temperaturas.

4.3.2 Análisis de sensibilidad. Modelo cinético

En lo que respecta al modelo cinético, las condiciones de simulación también vienen dadas por las *tablas 10 y 15*, variando en cada caso el parámetro de sensibilidad que aplica. La *tabla 25* muestra los rangos de operación de las variables estudiadas. Como ya se ha comentado en otras ocasiones, para realizar el análisis de sensibilidad de una variable se debe dejar como constante la otra variable. Dado también un volumen inmanejable de gráficas en las simulaciones del modelo cinético, se mostrarán aquellas de casos representativos.

Parámetro de sensibilidad	Rango de variación
Temperatura (°C)	750 - 900
Equivalence Ratio (-)	$0,25 \leq ER \leq 0,35$
Estado de fluidización (-)	$1,2 \leq u_0/u_{mf} \leq 6$

Tabla 25. Rangos valores de operación (T, ER, u_0/u_{mf}) adoptados para los análisis de sensibilidad del modelo cinético.

Temperatura

Antes de nada, para realizar el análisis de sensibilidad de la temperatura se tiene que dejar como constante el término del dosado y el u_0/u_{mf} . Por lo tanto, para comenzar el

análisis de sensibilidad de la temperatura, las gráficas que se muestran y analizan a continuación son a $ER=0,25$ y $u_0/u_{mf}=1,2$.

Para empezar, se observa en la *figura 60* un descenso leve de CO , H_2 y CH_4 (productos típicos de gasificación) en el rango de operación ($750^{\circ}C$ - $900^{\circ}C$), en cambio se esperaba un crecimiento de CO , H_2 con la temperatura. La causa se puede deber a la obtención de altas velocidades de reacción de las reacciones de combustión (homogéneas) en todo el rango de temperaturas estudiando, en consecuencia, dichas reacciones de combustión prevalecen sobre las reacciones de gasificación (heterogéneas), por lo tanto, de acuerdo a nuestro modelo cinético, la composición de CO y H_2 desciende con la temperatura.

Después, la *figura 61* muestra un crecimiento de la conversión de la biomasa desde los $750^{\circ}C$ (aproximadamente un 65% de conversión), hasta un 83% a los $900^{\circ}C$. Los resultados de las simulaciones entran dentro de los rangos típicos de eficiencia en la conversión (60-90%) [12].

Por último, La *figura 62* muestra el decrecimiento del PCI con la temperatura, a consecuencia del descenso CO , H_2 y CH_4 a lo largo del rango de temperaturas considerado, además, el PCI calculado es inferior a los valores típicos obtenidos en la experimentación, (4 - 7 MJ/Nm^3) [19] en todo el rango de temperatura. La causa se puede deber a la cinética implementada, de manera que las reacciones de combustión (homogéneas) consideradas en nuestro modelo cinético se suceden en mayor medida que las reacciones de gasificación (heterogéneas) a causa de obtener altas velocidades de reacción las reacciones de homogéneas de combustión frente a las reacciones heterogéneas de gasificación.

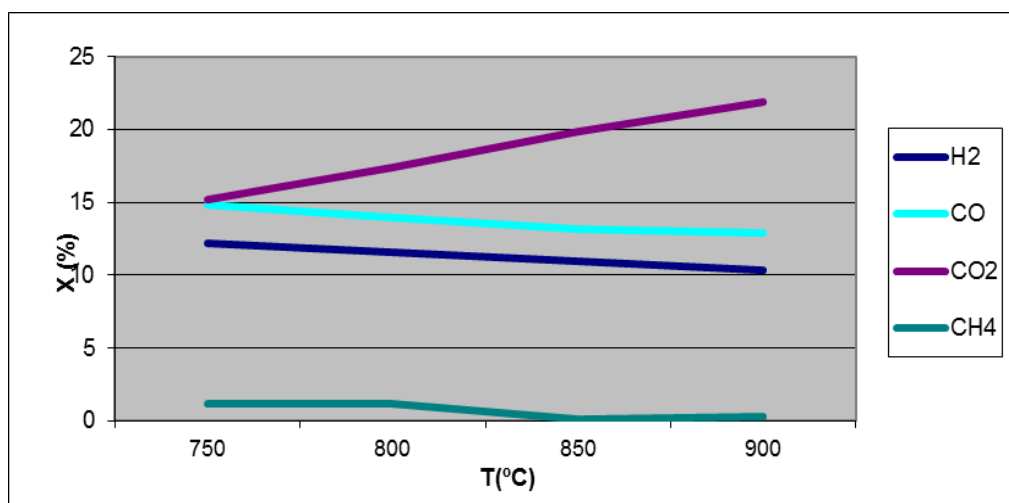


Figura 60. Evolución de la composición de los gases de síntesis a la salida del lecho con la temperatura para $ER=0,25$ y $u_0/u_{mf}=1,2$.

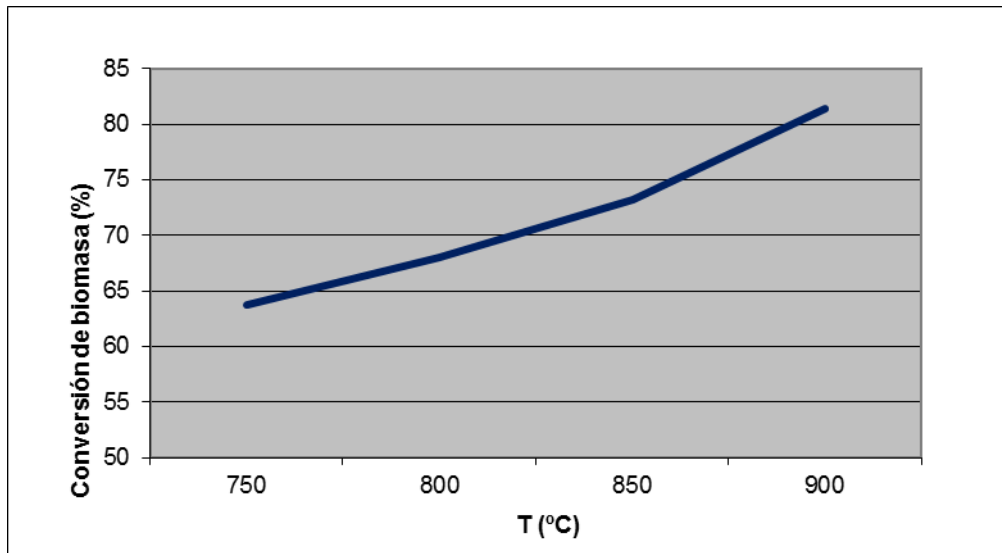


Figura 61. Evolución de la conversión de biomasa con la temperatura para $ER=0,25$ y $u_0/u_{mf}=1,2$.

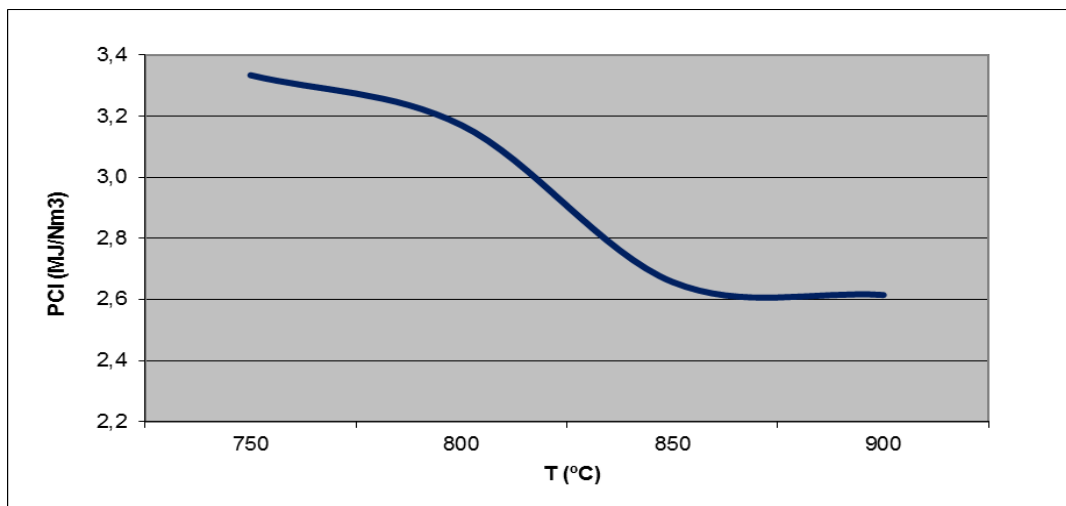


Figura 62. Evolución del PCI con la temperatura para $ER=0,25$ y $u_0/u_{mf}=1,2$.

A continuación, para seguir con el análisis de sensibilidad de la temperatura, se tratará de ver qué sucede para distintos valores de dosado y u_0/u_{mf} , a fin de poder llegar a conclusiones más profundas.

Primero, en cuanto a composición de gas se refiere, las tendencias de los resultados obtenidos para $ER=0,3$ y $ER=0,35$ son muy similares, variando en decimales con las tendencias de los resultados obtenidos para $ER=0,25$ como se puede ver en las *figuras 63 y 64*, de manera que se produce un descenso de CO , H_2 y CH_4 (productos típicos de gasificación) con la temperatura en los rangos de operación ($750-900^{\circ}C$). Como ya se ha comentado al respecto, debido a la cinética implementada, las reacciones de combustión (homogéneas) consideradas en nuestro modelo prevalecen sobre las reacciones de gasificación (heterogéneas) también consideradas en todo el rango de temperaturas de funcionamiento, por lo tanto, la composición de CO y H_2 descienden con la temperatura

independientemente del valor del dosado. Por otra parte, las tendencias de los resultados obtenidos para $u_0/u_{mf}=3$ y $u_0/u_{mf}=6$ difieren en algún aspecto con las tendencias de los resultados obtenidos para $u_0/u_{mf}=1,2$ como se puede apreciar en las *figuras 65 y 66*, de manera que sucede un cambio de tendencia en la composición de CO, H₂ y CH₄ a partir de 850°C en cuanto a que se produce un crecimiento de CO y H₂ hasta los 900°C (límite de la gasificación). Por lo tanto, de acuerdo a la cinética implementada, las reacciones heterogéneas se favorecen a altas temperaturas de gasificación para altos valores de u_0/u_{mf} . Una posible causa puede ser que se vean favorecidas las velocidades de reacción de las reacciones heterogéneas para altos valores de temperatura y u_0/u_{mf} .

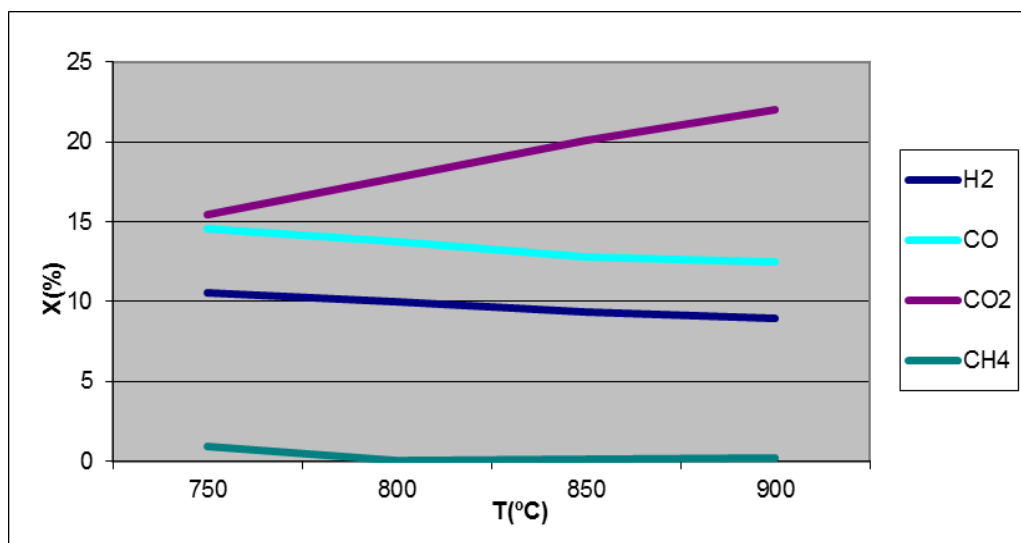


Figura 63. Evolución de la composición de los gases de síntesis a la salida del lecho con la temperatura para ER=0,30 y $u_0/u_{mf}=1,2$.

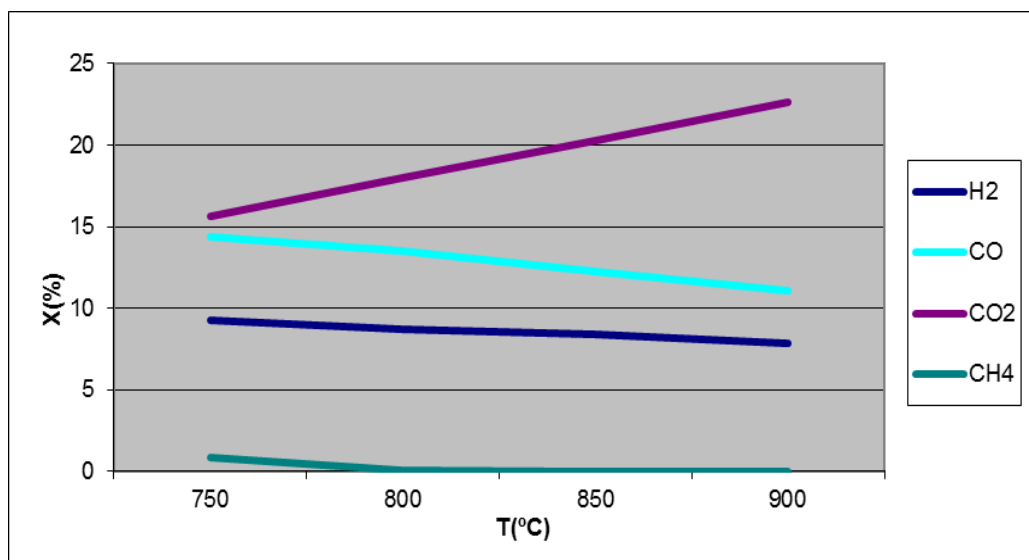


Figura 64. Evolución de la composición de los gases de síntesis a la salida del lecho con la temperatura para ER=0,35 y $u_0/u_{mf}=1,2$.

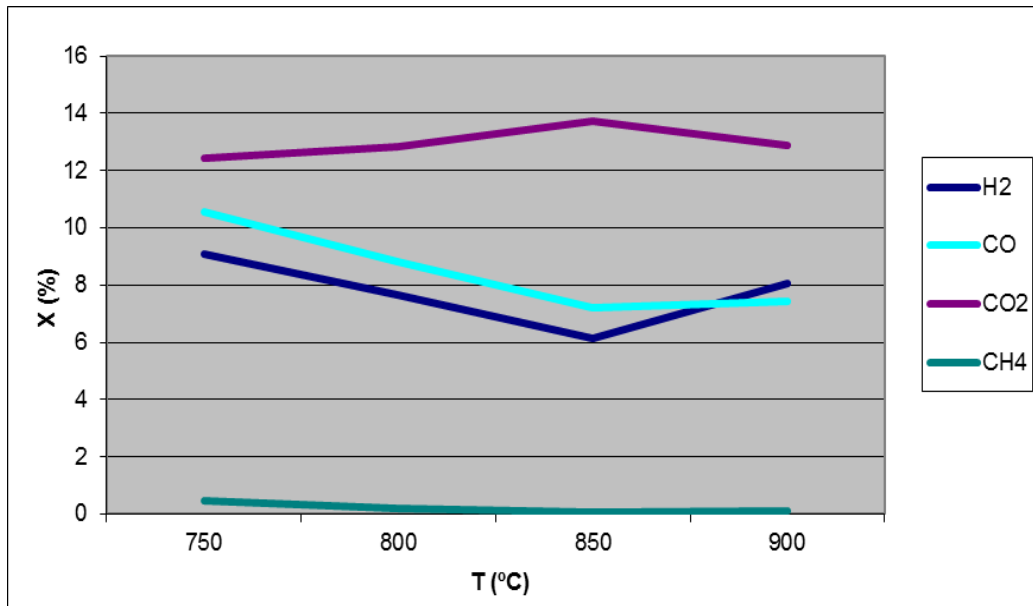


Figura 65. Evolución de la composición de los gases de síntesis a la salida del lecho con la temperatura para $u_0/u_{mf}=3$ y $ER=0,25$.

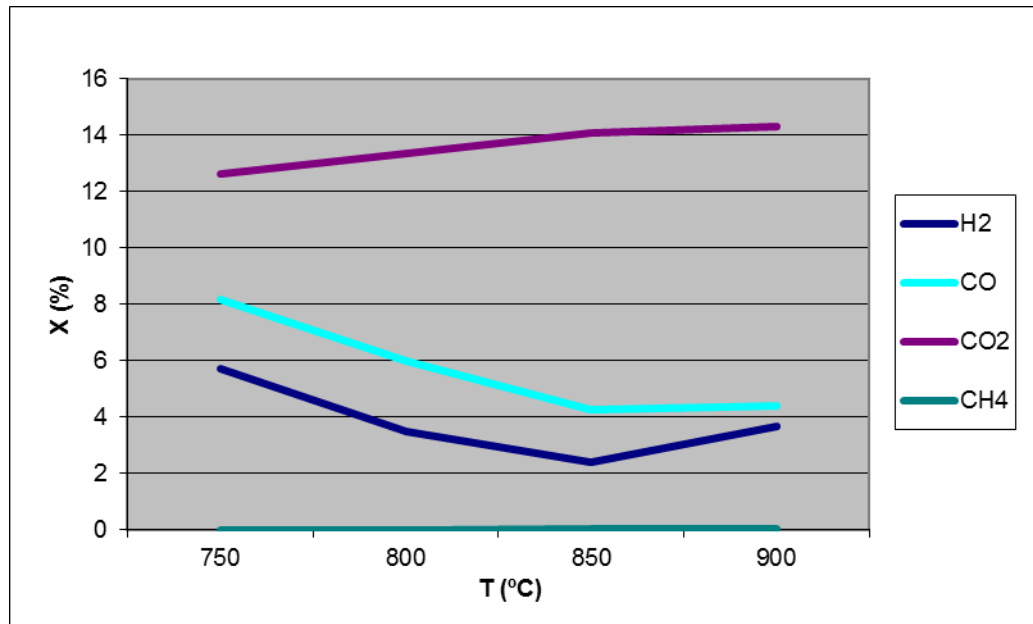


Figura 66. Evolución de la composición de los gases de síntesis a la salida del lecho con la temperatura para $u_0/u_{mf}=6$ y $ER=0,25$.

Después, la *figura 67* muestra un crecimiento de la conversión de biomasa desde los 750°C a los 900°C para $ER=0,3$ y $ER=0,35$ de la misma manera tal y como sucede para $ER=0,25$. Como era previsible, los resultados de la conversión de biomasa para estos valores de dosado también entran dentro de los rangos típicos de eficiencia en la conversión (60-90%) [12]. En lo que respecta a la cinética implementada, aumentar el dosado es favorecer a que se produzcan en mayor medida las reacciones homogéneas de combustión, de manera que la conversión de biomasa aumenta para cualquier valor de dosado en todo el rango de temperaturas como se observa en la *figura 67*. Por otro lado,

las tendencias de los resultados obtenidos para $u_0/u_{mf}=3$ y $u_0/u_{mf}=6$ difieren de los obtenidos para $u_0/u_{mf}=1,2$ como se puede apreciar en las *figura 68*, de manera que se produce un descenso de la conversión de biomasa con la temperatura. Como se ha visto en la experimentación, un aumento de la velocidad superficial del gas disminuye el tiempo de residencia de los gases en el lecho fluidizado, disminuyendo el grado de conversión de biomasa.

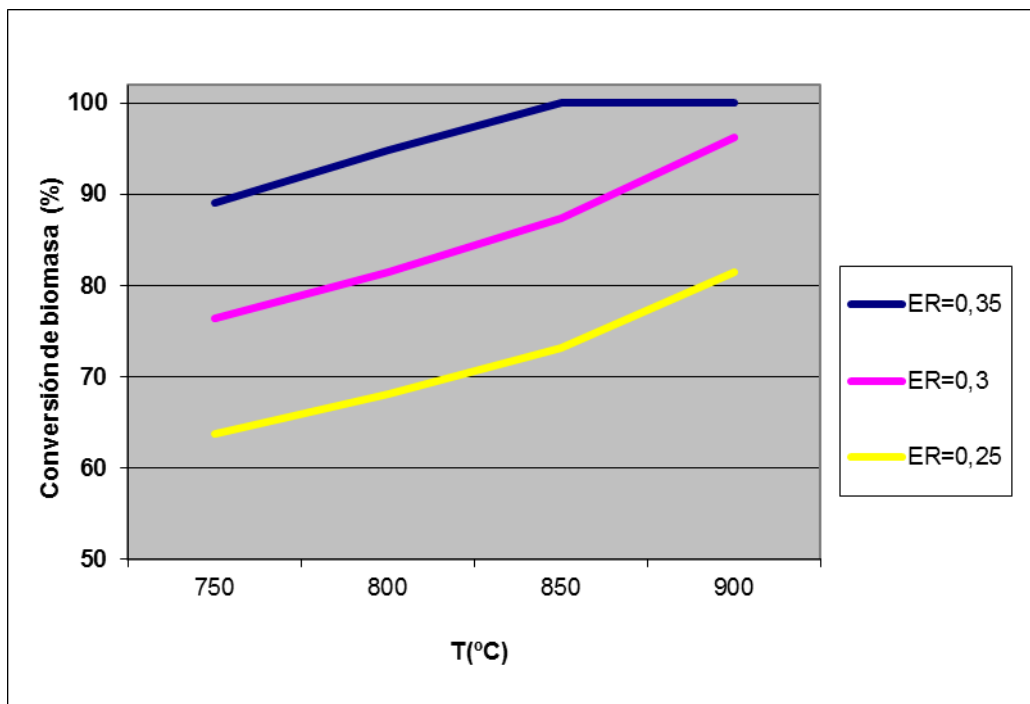


Figura 67. Evolución de la conversión de biomasa con la temperatura para distintos valores de dosado y $u_0/u_{mf}=1,2$.

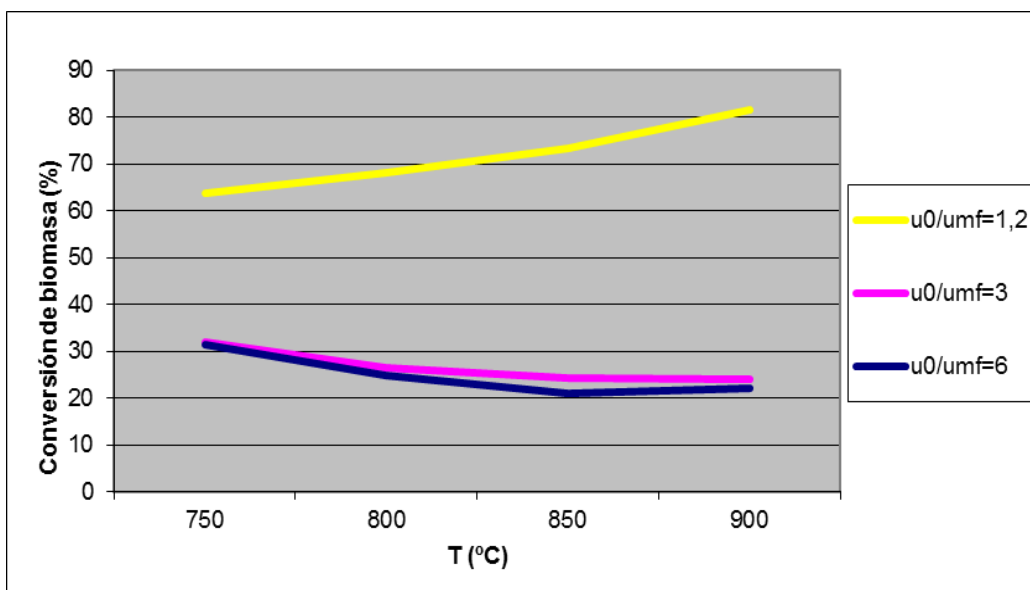


Figura 68. Evolución de la conversión de biomasa con la temperatura para distintos valores del estado de fluidización y $ER=0,25$

Para terminar, como era de esperar, la *figura 69* muestra el decrecimiento del PCI con la temperatura para $ER=0,30$ y $ER=0,35$ a consecuencia también del descenso de CO , H_2 y

CH_4 a lo largo del rango de temperaturas considerado. De la misma manera, la figura 60 muestra un cambio de tendencia del PCI a partir de 850°C para $u_0/u_{mf}=3$ y $u_0/u_{mf}=6$ visto también que se produce un crecimiento de CO y H_2 hasta los 900°C . También, en dichas figuras se puede observar que dentro de un valor de dosado hay mayor influencia del estado de fluidización sobre el PCI obtenido, mientras que para un valor del estado de fluidización, el dosado tiene menos influencia sobre el PCI final. Como ya se ha comentado al respecto, un aumento de la velocidad superficial del gas disminuye el tiempo de residencia de los gases en el lecho fluidizado, en consecuencia, se espera una disminución relativa de la influencia de las reacciones heterogéneas de gasificación con respecto a las reacciones homogéneas de combustión, en pocas palabras, las reacciones heterogéneas se suceden en menor medida al no disponer de tiempo suficiente para que se den en la zona de reacción. Sin embargo, un aumento del dosado favorece las reacciones de combustión homogéneas, pero no afecta al tiempo de residencia de los elementos en la zona de reacción por lo que las reacciones de heterogéneas de gasificación no se ven tan afectadas y se seguirán sucediendo. Por lo tanto, para resumir, un aumento del estado de fluidización afecta en mayor medida al PCI final que un aumento del dosado.

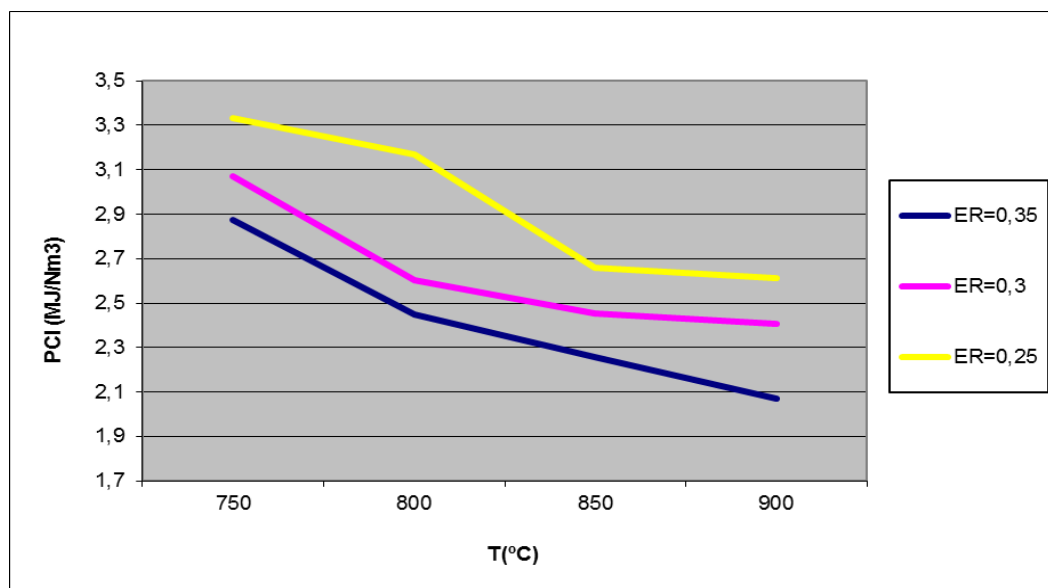


Figura 69. Evolución del PCI con la temperatura para distintos valores del dosado y $u_0/u_{mf}=1,2$.

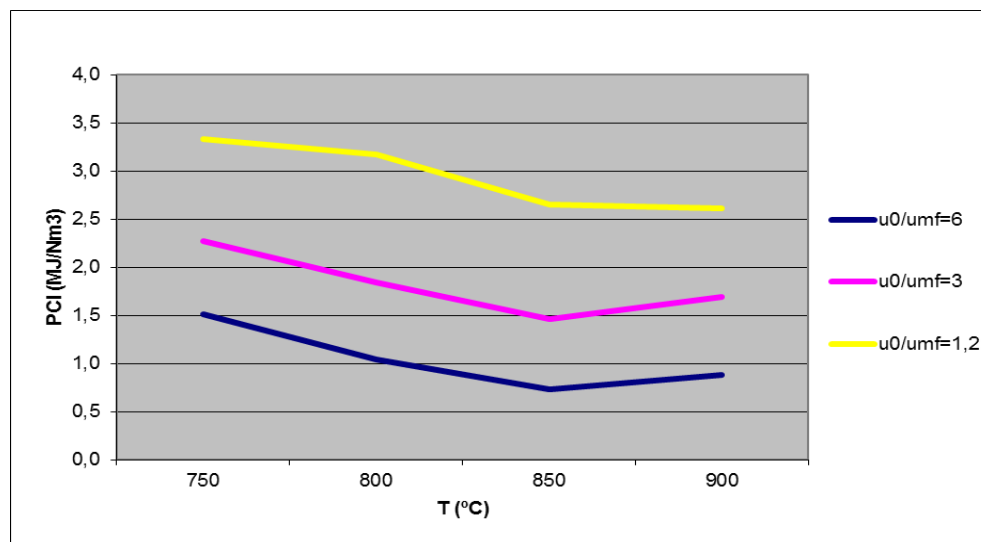


Figura 70. Evolución del PCI con la temperatura para distintos valores del estado de fluidización y $ER=0,25$.

Equivalence ratio (Dosado)

Para la realización del análisis de sensibilidad del dosado se tiene que dejar como constante el término de la temperatura y del estado de fluidización (u_0/u_{mf}). Por lo tanto, para comenzar el análisis de sensibilidad del *dosado*, las gráficas que se analizan y se muestran a continuación son a 800°C y $u_0/u_{mf}=1,2$.

En primer lugar, un aumento del dosado implica favorecer las reacciones de combustión homogéneas, es decir, que se sucedan en mayor medida que las reacciones de gasificación heterogéneas. En consecuencia, el contenido en CO_2 aumenta mientras disminuyen el contenido en H_2 , CO y CH_4 como muestra la *figura 71*. También, en dicha *figura 71* se puede observar como el aumento del dosado produce el descenso del H_2 en mayor medida que el descenso de CO , posiblemente, debido a que la velocidad de reacción de la combustión del H_2 es mayor que la velocidad de reacción de la combustión del CO . Además, en cuanto al CH_4 , se observa como para valores mayores de $ER=0,25$ la producción es muy baja, seguramente, debido a que se produce su combustión casi total.

De la misma manera, la conversión de biomasa aumenta de forma proporcional con el aumento del dosado con motivo de incrementar la tendencia a la reacción estequiométrica de combustión como se aprecia en la *figura 72*. También, en dicha figura se observa como el aumento de la conversión de biomasa es totalmente lineal con respecto al dosado, además, dichos valores se encuentran dentro de los rangos típicos de conversión (60-90%).

Por ultimo, el PCI disminuye con respecto al dosado como se observa en la *figura 73*. En dicha figura se observa un mayor descenso del PCI en el rango de dosado comprendido entre (0,25-0,30) visto que anteriormente en la *figura 71* se produce también un mayor

descenso del CH_4 en dicho rango. Como ya se ha comentado al respecto, los valores de PCI no entran dentro de los valores típicos obtenidos en la experimentación (4-7 MJ/Nm³) [19] en todo el rango de dosados, debido principalmente a la cinética implementada, la cual que favorece las reacciones de combustión homogéneas frente a las de gasificación heterogéneas, dado que se produce un incremento a la tendencia de la composición estequiométrica de todas las reacciones de combustión, de manera que se obtiene una bajo contenido de gas de síntesis.

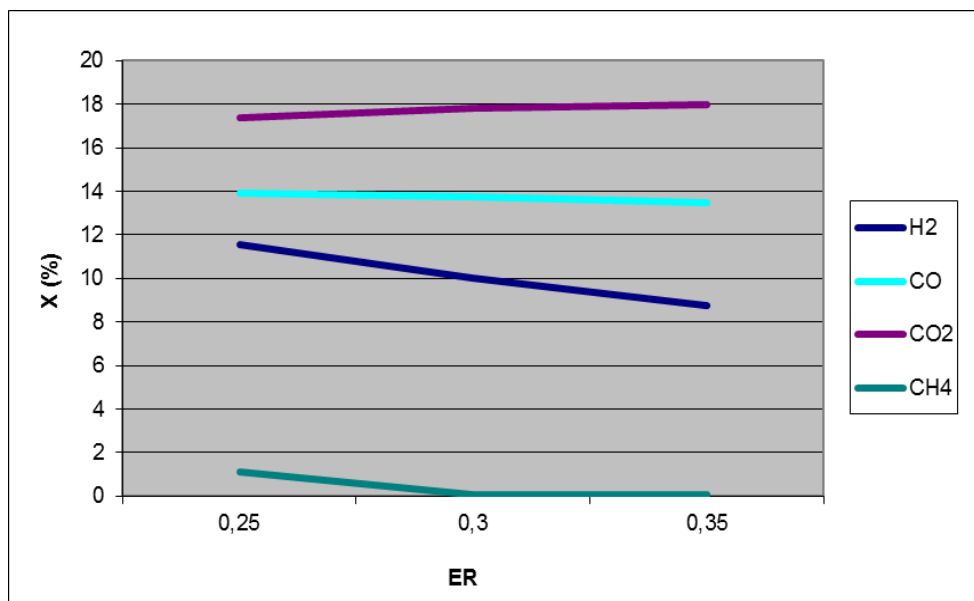


Figura 71. Evolución de la composición de los gases de síntesis a la salida del lecho con el dosado para $T=800^{\circ}\text{C}$ y $u_o/u_{mf}=1,2$.

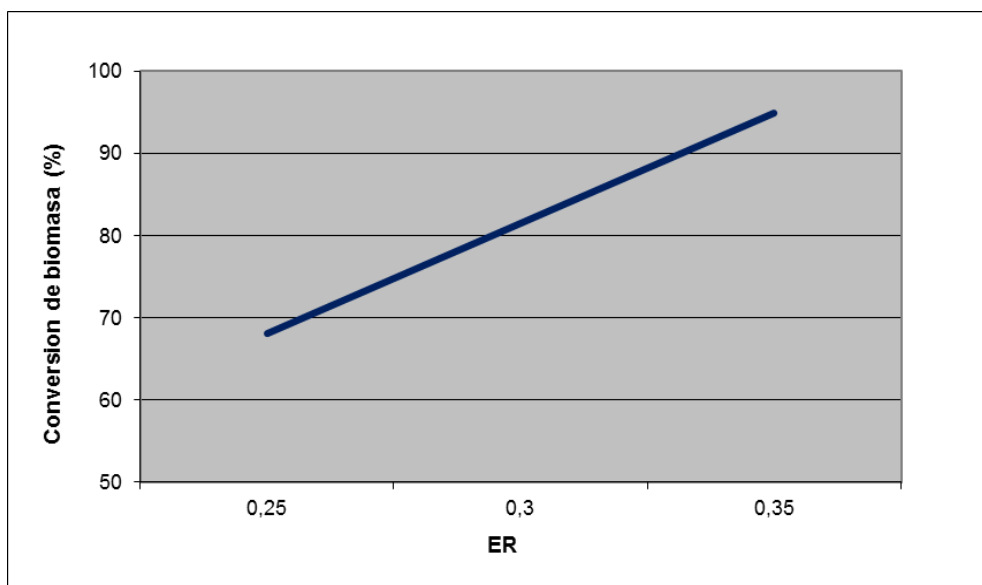


Figura 72. Evolución de la conversión de biomasa con en dosado para $T=800^{\circ}\text{C}$ y $u_o/u_{mf}=1,2$.

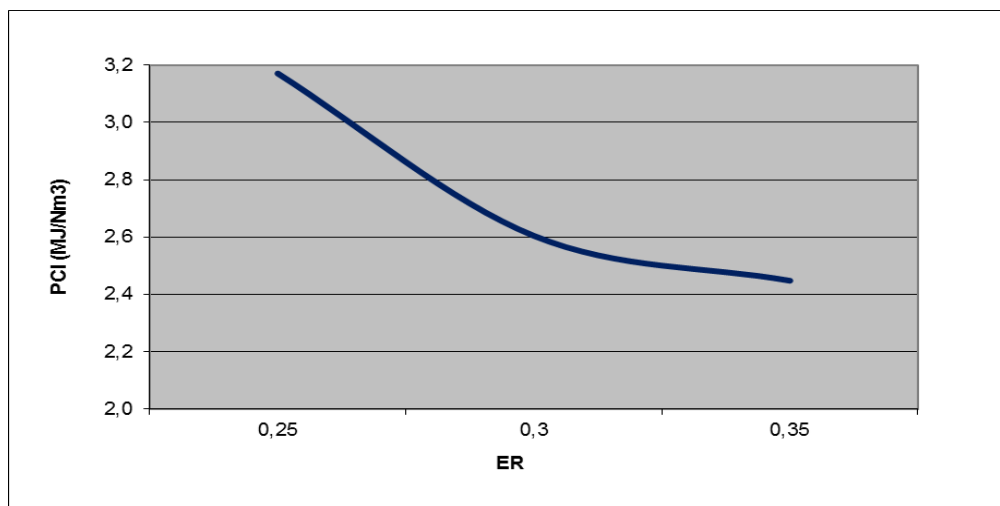


Figura 73. Evolución del PCI con el dosado para $T=800\text{ }^{\circ}\text{C}$ y $u_0/u_{mf}=1,2$.

A continuación, para seguir con el análisis de sensibilidad del dosado, se tratará de ver qué sucede para distintas temperaturas y estados de fluidización con el objetivo de poder obtener más conclusiones.

En primer lugar, en las *figuras 74 y 75* que se muestran a continuación, se puede observar que cualquier variación de la temperatura o del estado de fluidización no influye en las tendencias generales de los resultados en cuanto a composición de gas se refiere, aunque no obstante, se aprecian algunas pequeñas diferencias con el aumento de la temperatura y el estado de fluidización. Por ejemplo, en la *figura 75* se puede apreciar como a altas temperaturas, un aumento del dosado produce el descenso del CO en igual medida que el H_2 , cosa que no sucedía a bajas temperaturas. También, en dichas figuras se puede apreciar como para altas temperaturas y altos valores del estado de fluidización la composición de CH_4 es muy baja, debido principalmente a que se sucede en mayor medida la reacción de combustión del CH_4 frente a la reacción de *hydrogasificación* (producción de CH_4).

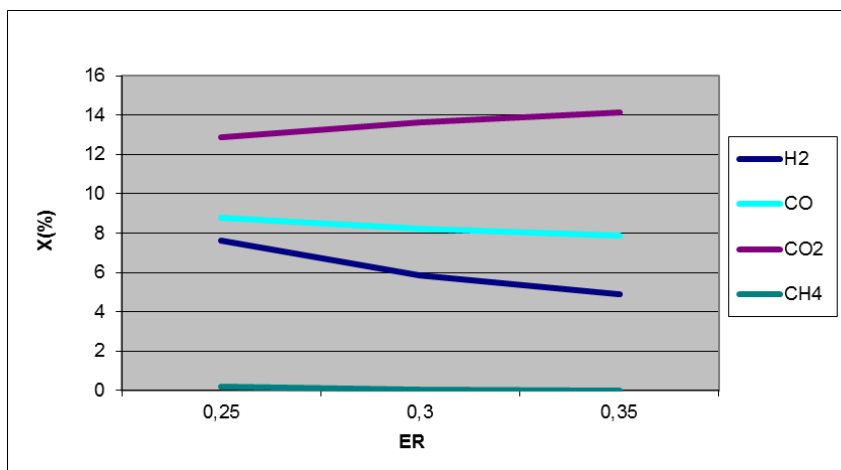


Figura 74. Evolución de la composición de los gases de síntesis a la salida del lecho con el dosado para $T=800^{\circ}\text{C}$ y $u_0/u_{mf}=3$.

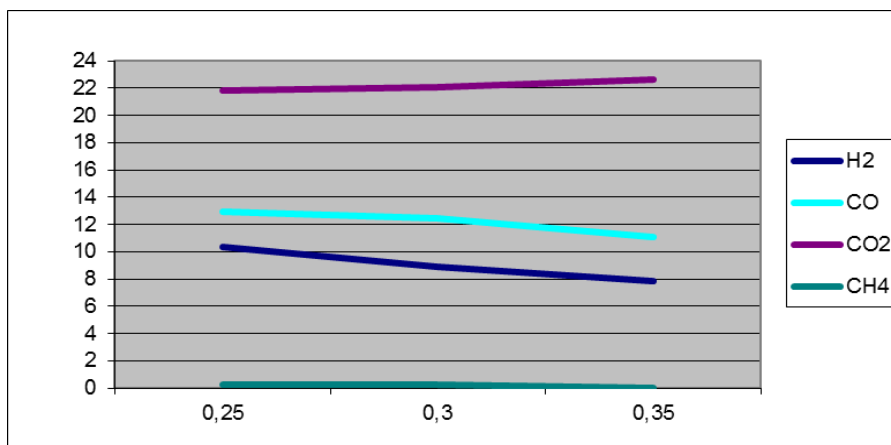


Figura 75. Evolución de la composición de los gases de síntesis a la salida del lecho con el dosado para $T=900^{\circ}\text{C}$ y $u_0/u_{mf}=1,2$.

Después, en las *figuras 76 y 77*, se puede observar como la conversión de biomasa aumenta también de forma lineal con el dosado para cualquier valor de temperatura y u_0/u_{mf} . Los valores de conversión de biomasa con respecto al dosado para cualquier valor de temperatura se encuentran dentro de los rangos típicos de [12] conversión (60-90%), llegando al 100% de conversión total a 850°C y 900°C para valores altos de dosado (ver *figura 76*). Además, en la *figura 76*, también se puede apreciar claramente como un aumento de la temperatura aumenta el grado de conversión de biomasa, de la misma manera tal y como sucedía en el análisis de sensibilidad de la temperatura (*figura 67*). Por otra parte, en la *figura 77* se puede observar la similitud de las curvas de la conversión de biomasa para $u_0/u_{mf}=3$ y $u_0/u_{mf}=6$ de la misma manera tal y como sucedida también en el análisis de sensibilidad de la temperatura (*figura 68*) en donde las curvas de las conversión de biomasa con respecto a la temperatura para $u_0/u_{mf}=3$ y $u_0/u_{mf}=6$ también eran muy similares. Por lo tanto, todo parece indicar que existe un valor de del estado de fluidización para el cual el tiempo de residencia de los gases en el lecho fluidizado no es suficiente para que se produzcan las reacciones de conversión de la biomasa situado entre 1,2 y 3 veces la mínima fluidización como se desarrollara en el siguiente punto del estudio del análisis de sensibilidad del estado de fluidización.

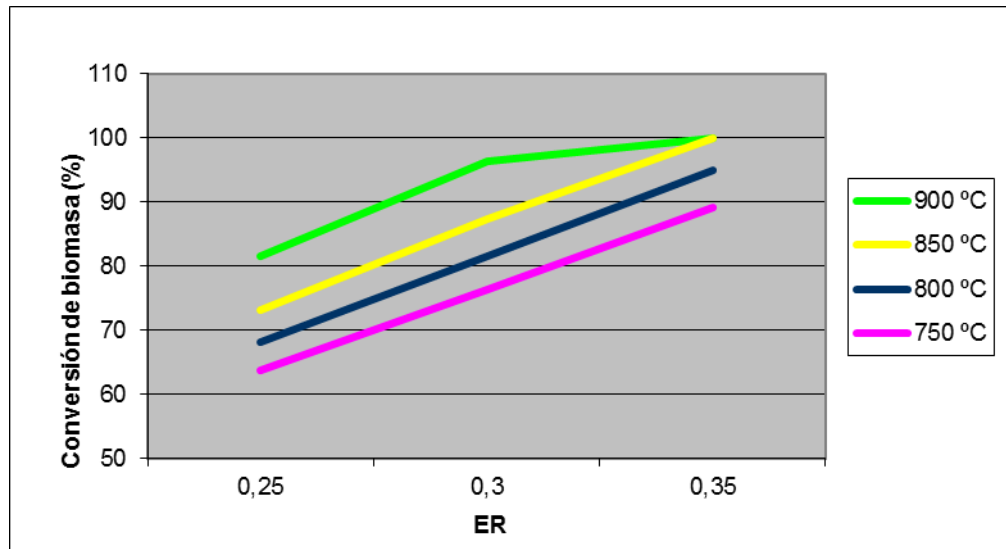


Figura 76. Evolución de la conversión de biomasa con en dosado para distintos valores de temperatura y $u_0/u_{mf}=1,2$.

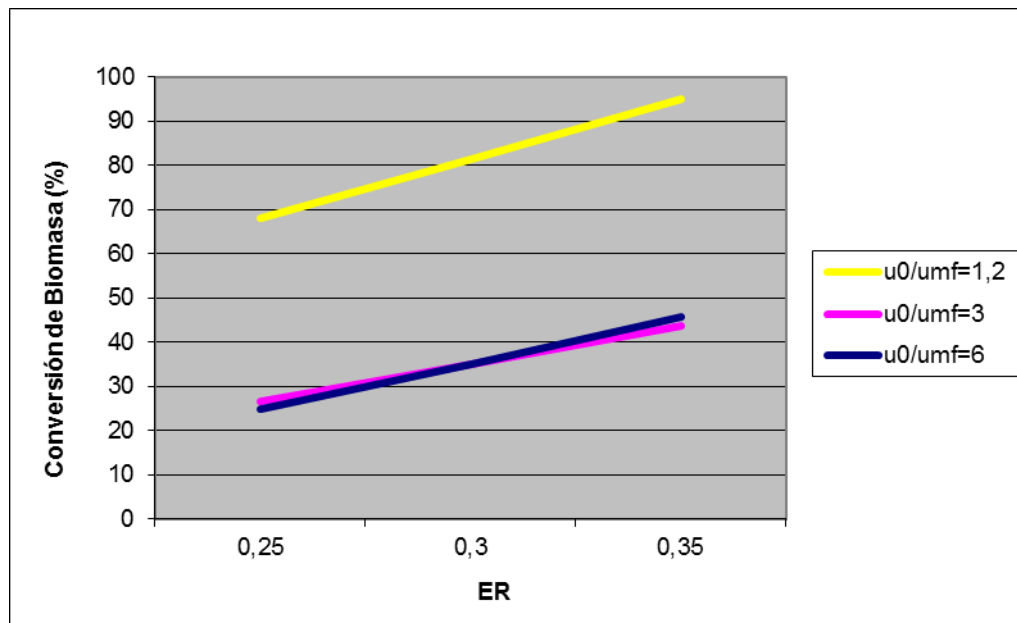


Figura 77. Evolución de la conversión de biomasa con en dosado para distintos valores del estado de fluidización a $T=800^{\circ}\text{C}$.

Para terminar, en la *figura 78* se puede observar como el PCI disminuye con respecto el dosado para cualquier temperatura. En lo que respecta a las distintas formas de las curvas para cada temperatura, tiene que ver con la producción de CH_4 . De manera que las curvas para 750°C y 800°C presentan altos valores de PCI a bajos valores de dosado ($\text{ER}=0,25$), lo que provocan una forma de bañera, en cambio, para altos valores de temperatura la producción de CH_4 es menor a bajos valores de dosado, de manera que las curvas del PCI para altas temperaturas presenta una forma inversa a las curvas de baja temperatura. Finalmente, la *figura 79* muestra también el descenso del PCI con respecto el *dosado* para distintos valores del estado de fluidización. Las curvas para $u_0/u_{mf}=3$ y $u_0/u_{mf}=6$ presentan

valores muy bajos de PCI y una forma muy plana, debido principalmente, a que un aumento del estado de fluidización disminuye el tiempo de residencia de los gases en el lecho fluidizado, disminuyendo la producción de los gases de síntesis para todo el rango de dosado.

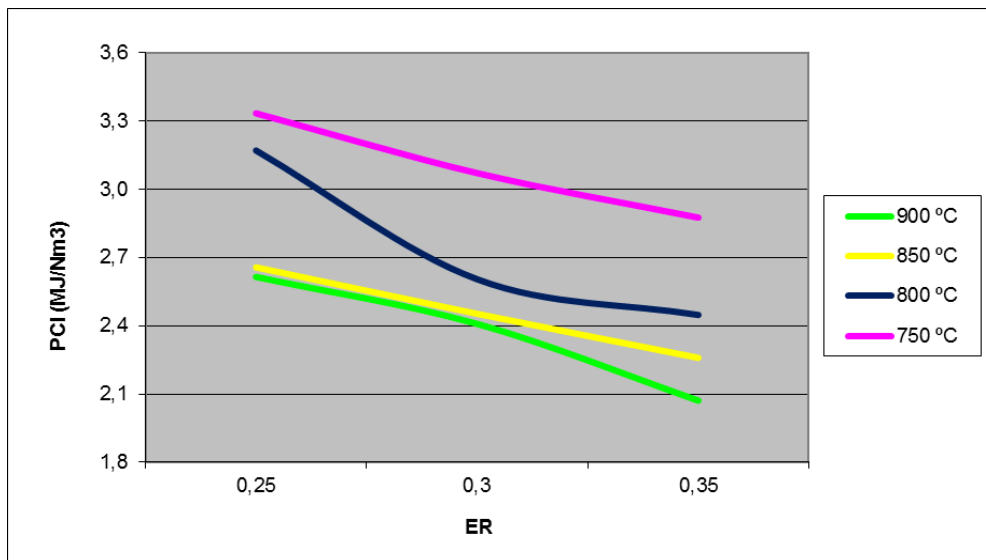


Figura 78. Evolución del PCI con el dosado para distintas temperaturas a $u_0/u_{mf}=1,2$.

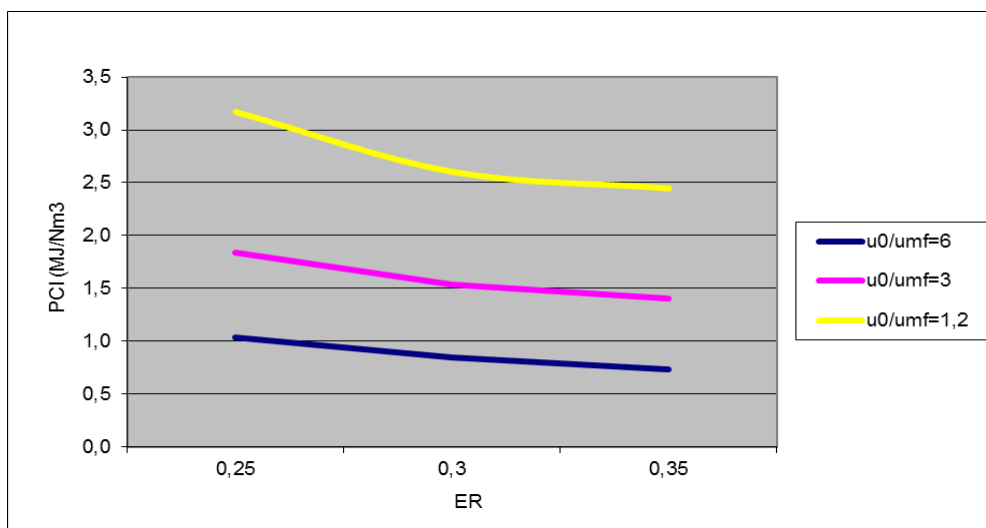


Figura 79. Evolución del PCI con el dosado para distintos valores del estado de fluidización a $T=800^{\circ}\text{C}$.

Estado de fluidización

Finalmente, se realizará el estudio de sensibilidad del estado de fluidización (u_0/u_{mf}). Para la realización del análisis de sensibilidad del estado de fluidización se tiene que dejar como constante el término de la temperatura y del dosado, por lo tanto, las siguientes gráficas que se muestran y analizan son a 800°C y $ER=0,25$.

En primer lugar, en lo que respecta a un aumento del estado de fluidización, se traduce en una disminución del tiempo de residencia del aire en la zona de reacción, en consecuencia, se espera una disminución relativa de la influencia de las reacciones

heterogéneas con respecto a las reacciones homogéneas. Por lo tanto, la composición de todos los componentes del gas de síntesis (H_2 , CO y CH_4) disminuye con el estado de fluidización como muestra la *figura 80*. En dicha *figura 80* se observa como a partir de $u_0/u_{mf}=3$ la composición de H_2 continua con la misma pendiente descendiente, mientras que la composición de CO se hace menos sensible al aumento del u_0/u_{mf} al cambiar ligeramente la pendiente, posiblemente, debido a que la reacción de combustión del H_2 (*R4*) se sucede en mayor medida que la reacción de combustión del CO (*R5*), en consecuencia, la composición de agua (producto de la reacción de combustión de H_2) aumenta mientras que la composición de CO_2 (producto de la combustión del CO) aumenta ligeramente. De la misma manera, la composición de CH_4 disminuye con el estado de fluidización hasta un valor de $u_0/u_{mf}=3$, en donde la producción de CH_4 es prácticamente nula debido a que la reacción de combustión del metano (*R6*) se sucede en mayor medida que la reacción de *hydrogasificación* (*R2*).

Luego, como ya se ha comentado anteriormente, un aumento de la velocidad superficial del gas disminuye el tiempo de residencia de los distintos componentes en la zona de reacción, disminuyendo el grado de conversión de biomasa, mostrado en la *figura 81*. A partir de $u_0/u_{mf}=3$ la combustión casi total del CH_4 debido al exceso de oxígeno, provoca se suceda en mayor medida la reacción de combustión del carbono, de tal manera que a partir de dicho valor ($u_0/u_{mf}=3$) la conversión de biomasa es menos sensible al aumento del estado de fluidización.

Por último, como era de esperar, la *figura 82* muestra como PCI disminuye con el aumento del estado de fluidización, puesto que disminuye el tiempo de residencia de los gases en el lecho fluidizado, disminuyendo la producción de los gases de síntesis.

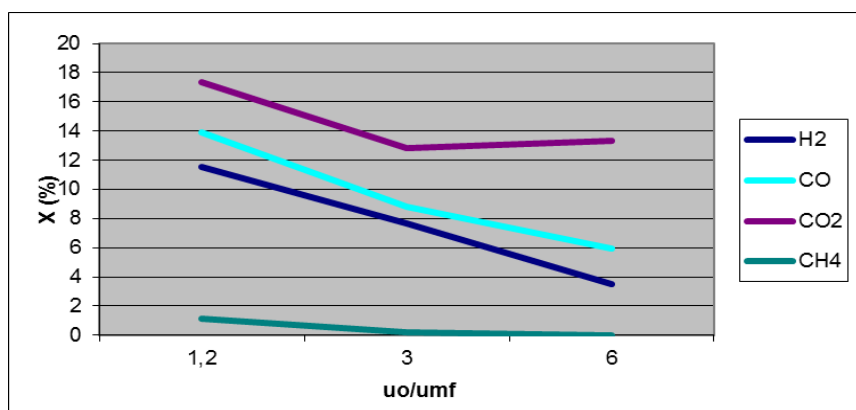


Figura 80. Evolución de la composición de los gases de síntesis a la salida del lecho con el estado de fluidización para $T=800^{\circ}C$ y $ER=0,25$.

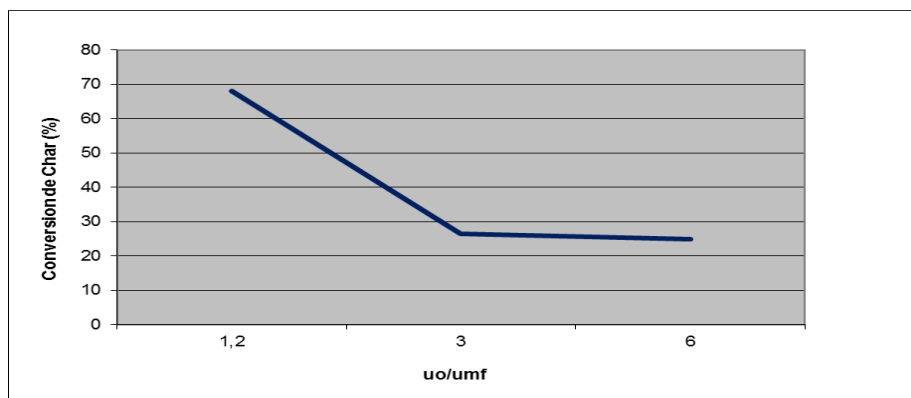


Figura 81. Evolución de la conversión de biomasa con el estado de fluidización para $T=800^{\circ}\text{C}$ y $ER=0,25$.

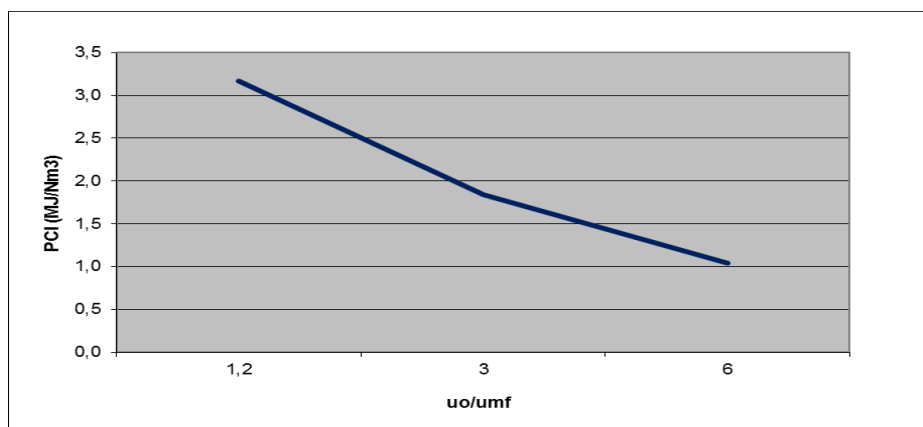


Figura 82. Evolución del PCI con el estado de fluidización para $T=800^{\circ}\text{C}$ y $ER=0,25$.

A continuación, para terminar el estudio, se tratará de ver cómo influyen las variaciones de temperatura y dosado en el estado de fluidización.

Para empezar, como ya se ha comentado al respecto, un aumento del estado de fluidización se traduce en una disminución de la influencia de las reacciones heterogéneas con respecto a las reacciones homogéneas. Así pues, los componentes del gas de síntesis (H_2 , CO , CH_4) disminuyen con el estado de fluidización para cualquier valor de temperatura y dosado como muestran las *figuras 83 y 84*. También, en la *figura 83* se puede apreciar como la composición de CO es muy similar a la composición de H_2 a altas temperaturas, puesto que como ocurre en la experimentación, se produce un dominio de las reacciones de *Boudouard* y *Steam reforming* (*R9* y *R10*, respectivamente) incrementando el contenido en CO . Por otro lado, en la *figura 84* se observa como la composición de H_2 es menor que la composición de CO en todo el rango de valores del estado de fluidización para altos valores de dosado, a consecuencia, de la mayor combustión del H_2 con respecto al CO para altos valores de dosado. De la misma manera, en las *figuras 83 y 84* también se observa como la composición de CH_4 es prácticamente nula debido a que la reacción de combustión del CH_4 (*R6*) se sucede en mayor medida que

la reacción de *hydrogasificación* (R2) del metano para altos valores de temperatura y dosado. En relación al aumento del CO_2 a partir de $u_0/u_{mf}=3$, es consecuencia de la mayor influencia de las reacciones de combustión homogéneas (las cuales producen CO_2) respecto a las reacciones heterogéneas de gasificación (las cuales consumen CO_2).

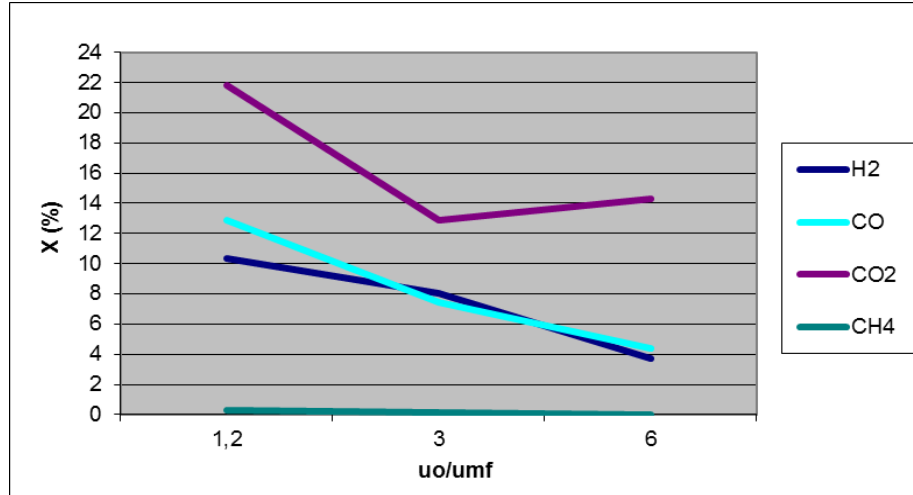


Figura 83. Evolución de la composición de los gases de síntesis a la salida del lecho con el estado de fluidización para $T=900^\circ\text{C}$ y $ER=0,25$.

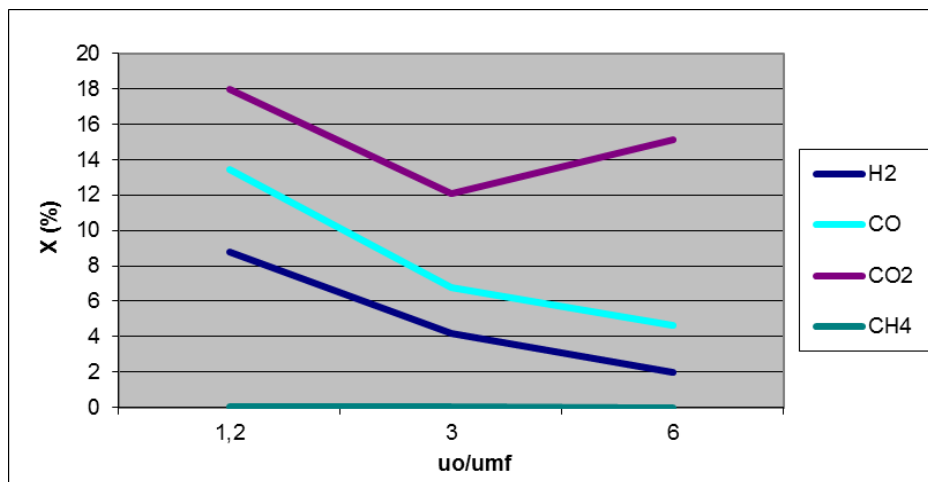


Figura 84. Evolución de la composición de los gases de síntesis a la salida del lecho con el estado de fluidización para $T=800^\circ\text{C}$ y $ER=0,35$.

Luego, en lo que respecta a la conversión de biomasa, independientemente del valor de la temperatura y el dosado, un aumento del estado de fluidización disminuye el tiempo de residencia de los distintos componentes en la zona de reacción, disminuyendo el grado de conversión de biomasa, como muestran las *figuras 85 y 86*. También, por otro lado, en la *figura 85* se puede observar como para cualquier temperatura la conversión de biomasa está acotada en un rango relativamente estrecho, en resumen, la conversión de biomasa es mas sensible a la variación del estado de fluidización que a la temperatura, sin embargo, no ocurre lo mismo para cualquier valor de dosado (*figura 86*), en donde el rango esta

menos acotado, por lo que una variación del dosado si influye en mayor medida. Definitivamente, con las *figuras 85 y 86* se puede llegar a la conclusión de que la combustión casi total del CH_4 a partir de $u_0/u_{mf}=3$ provoca que se suceda en mayor medida la reacción de combustión del carbono por exceso de oxígeno, de manera que la conversión de biomasa se hace menos sensible al aumento del estado de fluidización a partir de $u_0/u_{mf}=3$, e incluso aumente ligeramente a partir de dicho valor independientemente del valor de temperatura y dosado.

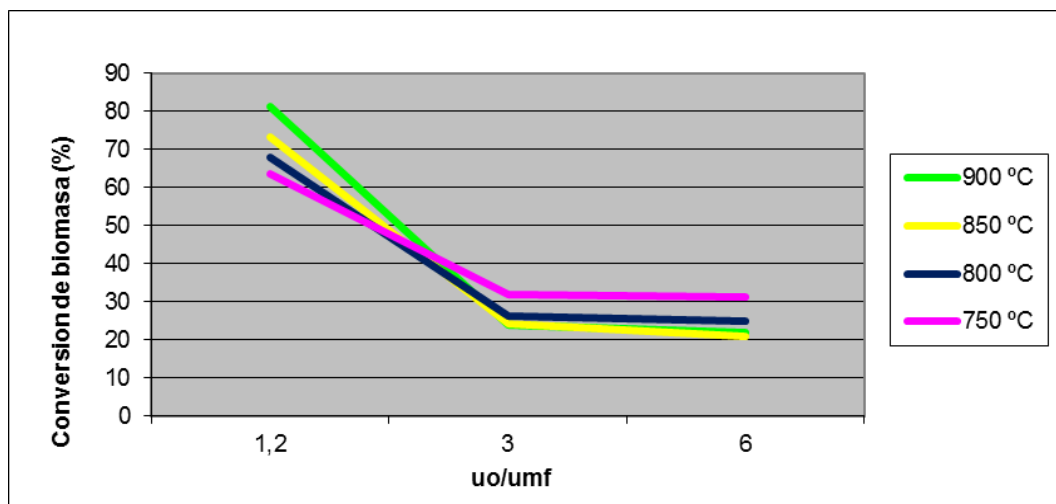


Figura 85. Evolución de la conversión de biomasa con el estado de fluidización para distintos valores de temperatura a $ER=0,25$.

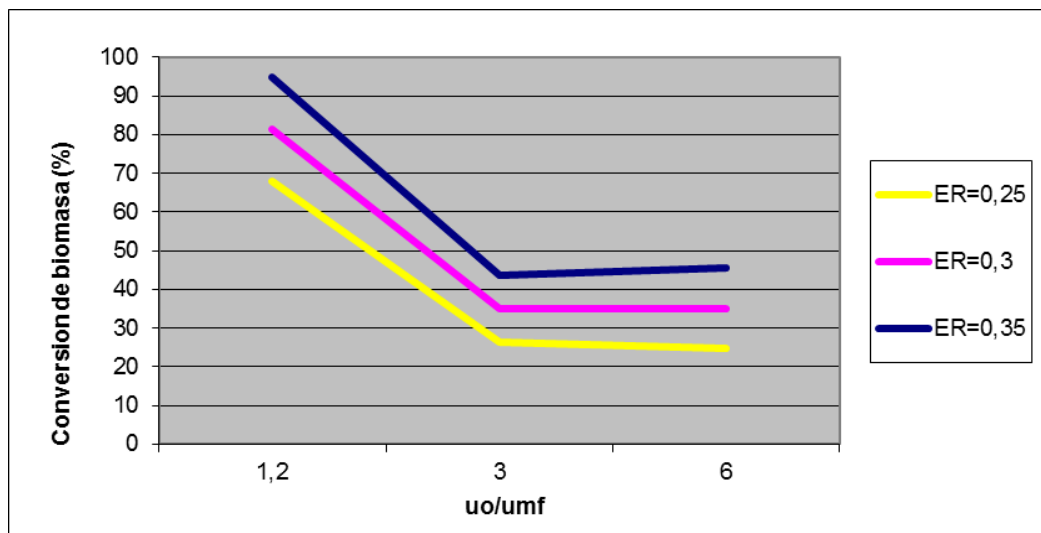


Figura 86. Evolución de la conversión de biomasa con el estado de fluidización para distintos valores del dosado a $T=800^\circ\text{C}$.

Para finalizar, la *figuras 87 y 88* muestran como PCI disminuye con el aumento del estado de fluidización para cualquier valor de temperatura y dosado, dado que disminuye la producción de los gases de síntesis. Finalmente, se puede destacar la posible convergencia del PCI a altos valores del estado de fluidización independientemente del valor del dosado, posiblemente, dado que prevalece la combustión completa de CO , H_2 y

CH_4 sobre las reacciones de gasificación que producen aquellas especies, de modo que el balance neto es la de desaparición de CO , H_2 y CH_4 .

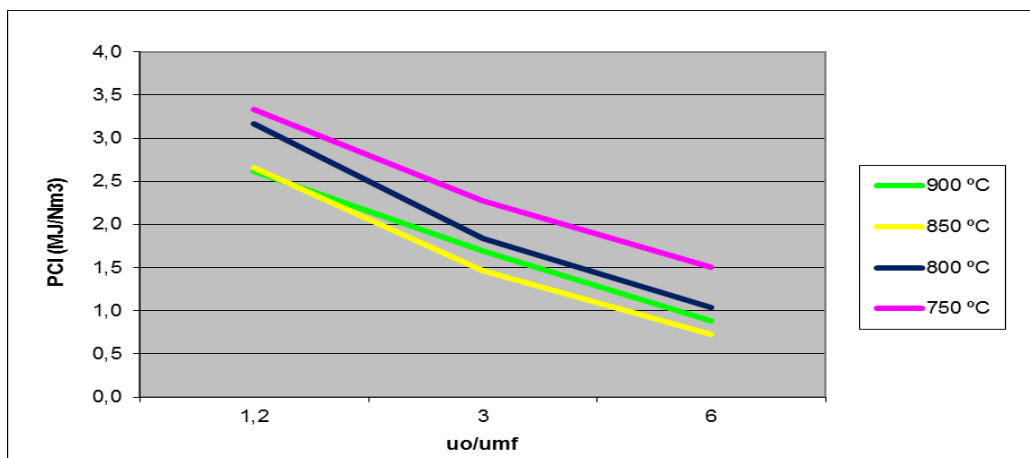


Figura 87. Evolución del PCI con el estado de fluidización para distintos valores de temperatura a $\text{ER}=0,25$.

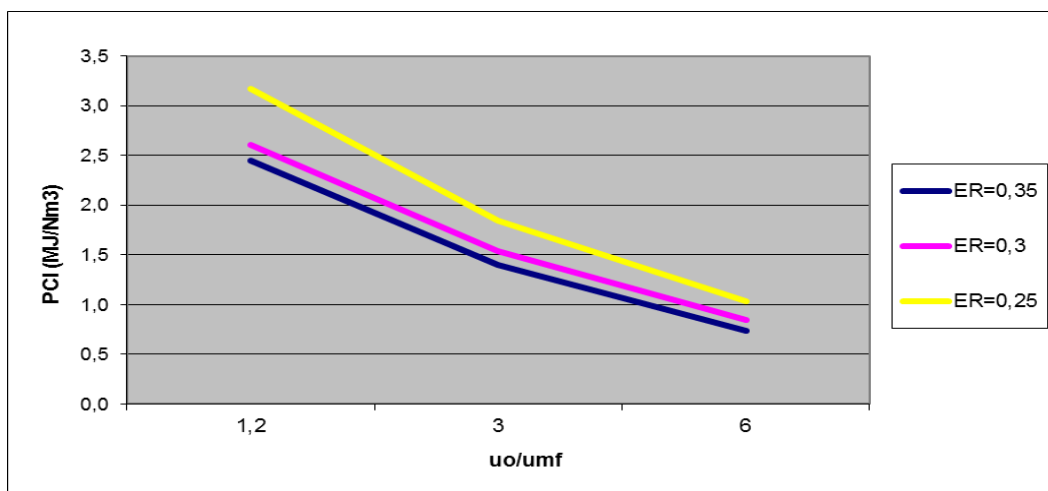


Figura 88. Evolución del PCI con el estado de fluidización para distintos valores del dosado a $T=800^\circ\text{C}$.

4.4 Comparación de ambos modelos (cinético y de equilibrio)

A continuación, se compararán los resultados arrojados por ambos modelos con el fin de determinar los puntos fuertes y los puntos débiles de cada modelo y así tratar de dilucidar las principales limitaciones en la simulación del proceso. Finalmente, con esto se podrá definir unas pautas para la mejora de este tipo de herramientas de simulación. Por lo tanto, se compararán los resultados arrojados de composición de gas, conversión de biomasa y PCI con respecto a la temperatura y dosado de ambos modelos.

Para empezar, en la *figura 89* se observa como la composición de H_2 aumenta con respecto a la temperatura según el modelo de equilibrio mientras que disminuye según el modelo cinético. Además, los valores arrojados de composición de H_2 por el modelo de equilibrio son muy altos con respecto a los valores arrojados por el modelo cinético, los

cuales difieren en menos de un 5% con respecto a los resultados experimentales. Como ya se ha comentado al respecto en el análisis de ambos modelos, la explicación se encuentra en la diferencia de los modelos implementados, de manera que el modelo de equilibrio se basa en el equilibrio termodinámico de las especies reaccionantes presentes en el sistema, en donde para desarrollar dicho modelo no hace falta conocer los mecanismos cinéticos de conversión de la biomasa, en consecuencia, no se han incorporado reacciones como la combustión del carbón, ni reacciones típicas que consumen H_2 como $R3$, las cuales si se han tenido en cuenta en el desarrollo del modelo cinético. De la misma manera, en la *figura 90* se observa como la composición de CO aumenta según el modelo de equilibrio mientras disminuye según el modelo cinético, aunque en este caso hay una similitud en cuanto a los valores arrojados por ambos modelos, los cuales son muy similares a los experimentales. Después, en la *figura 91*, se observa como la composición de CH_4 desciende con respecto a la temperatura para ambos modelos, de la misma manera tal y como muestra la experimentación, en cambio, los valores de composición según el modelo cinético son muy bajos, posiblemente, debido a la baja velocidad de reacción de las reacciones que producen de CH_4 como $R2$ (*hydrogasificación*) y $R3$, o también, debido al cálculo de una alta velocidad de reacción de la reacción de combustión del metano ($R6$). Finalmente, en la *figura 92* se observa como la composición de CO_2 disminuye según el modelo de equilibrio tal y como sucede en la experimentación, mientras aumenta para el modelo cinético, por culpa de la mayor influencia de las reacciones homogéneas de combustión frente a las heterogéneas de gasificación para dicho modelo cinético.

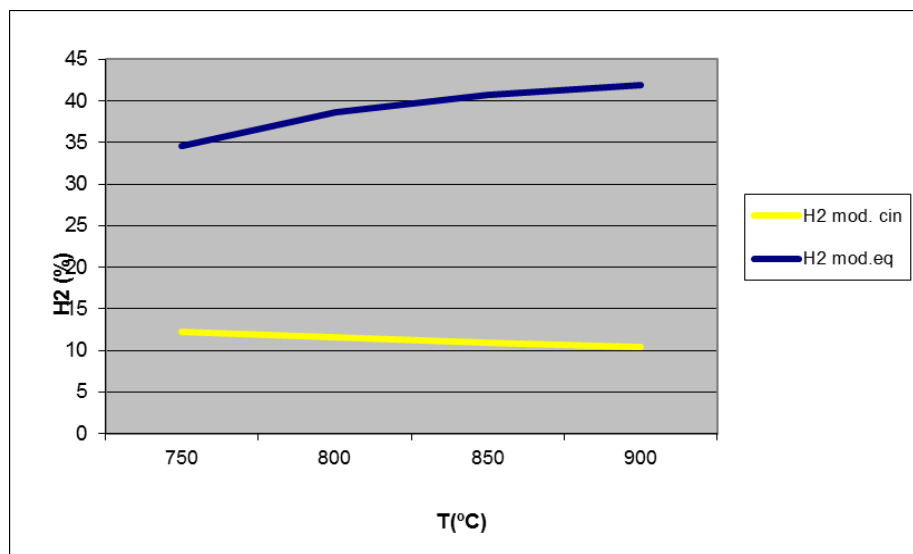


Figura 89. Evolución de la composición de H_2 a la salida del lecho con la temperatura para $ER=0,25$ y $u_0/u_{mf}=1,2$.

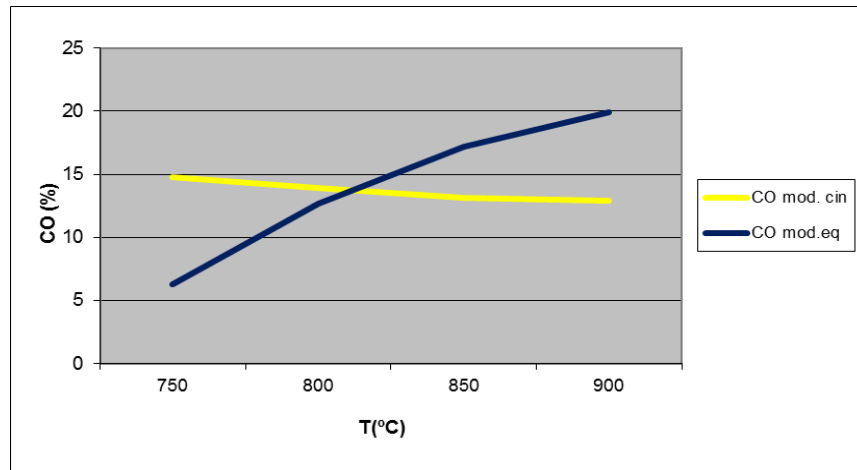


Figura 90. Evolución de la composición de CO a la salida del lecho con la temperatura para $ER=0,25$ y $u_o/u_{mf}=1,2$.

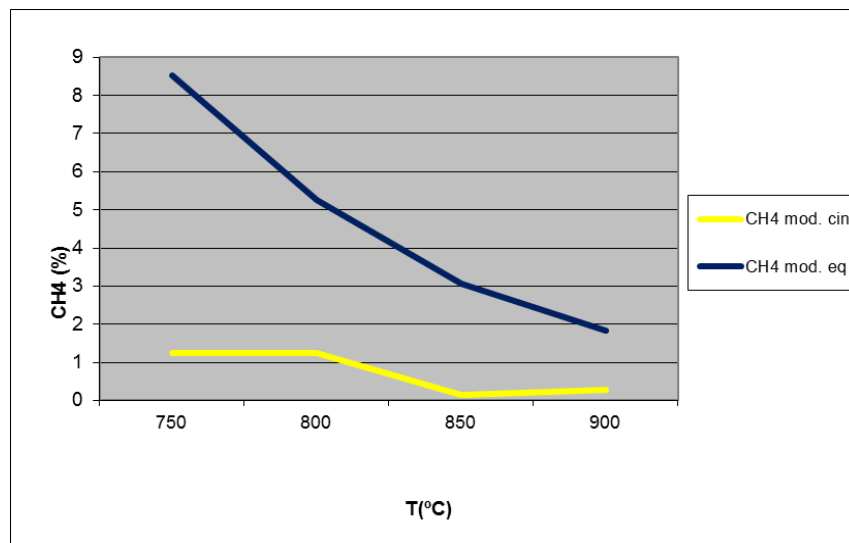


Figura 91. Evolución de la composición de CH_4 a la salida del lecho con la temperatura para $ER=0,25$ y $u_o/u_{mf}=1,2$.

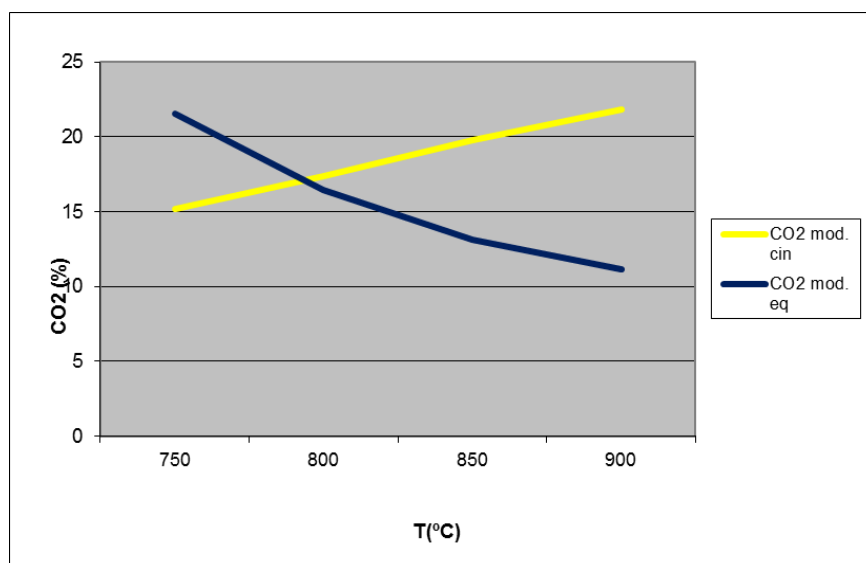


Figura 92. Evolución de la composición de CO_2 a la salida del lecho con la temperatura para $ER=0,25$ y $u_o/u_{mf}=1,2$.

Luego, la *figura 93* muestra un crecimiento de la conversión de biomasa desde los 750°C a los 900°C para ambos modelos con respecto a la temperatura tal y como muestra la experimentación. Los resultados de conversión de biomasa de las simulaciones para el modelo cinético entran dentro de los rangos típicos de eficiencia en la conversión (60-90%) [12]. En cambio, no sucede lo mismo para el modelo de equilibrio, en donde los resultados de la conversión de biomasa no entran dentro de los rangos típicos de eficiencia, dado que el modelo de equilibrio implementado se basa en parámetros termodinámicos y por tanto no tiene en cuenta mecanismos cinéticos de conversión de la biomasa, por lo que no se han incorporado reacciones como la combustión del carbón en dicho modelo.

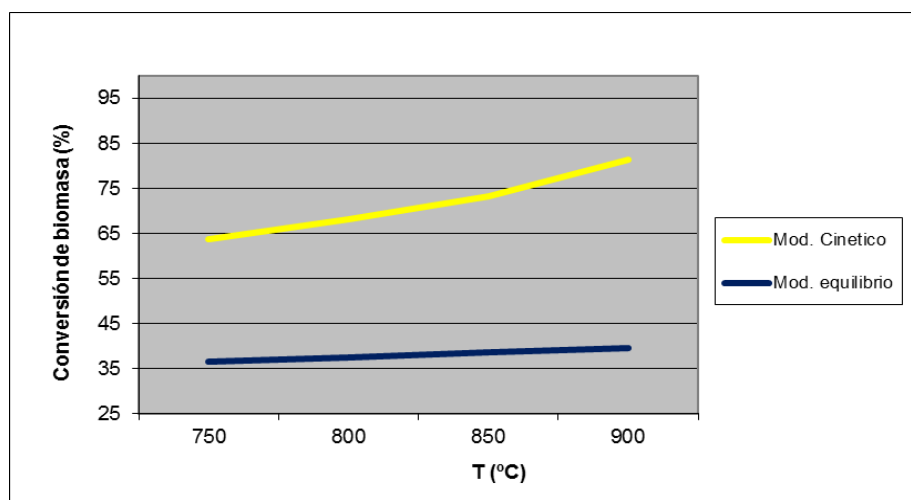


Figura 93. Evolución de la conversión de biomasa a la salida del lecho con la temperatura para $ER=0,25$ y $u_0/umf=1,2$.

Finalmente, como era de esperar, la *figura 94* muestra el crecimiento del PCI con la temperatura según el modelo de equilibrio, debido también al crecimiento del H_2 y del CO con la temperatura, al contrario, se observa el decrecimiento de PCI con la temperatura según el modelo cinético a causa del decrecimiento de la composición de los gases de síntesis (H_2 , CO y CH_4) con la temperatura. El PCI obtenido en el modelo de equilibrio es algo superior con respecto a nuestros resultados experimentales debido a la alta composición de H_2 , puesto que el CH_4 y CO presentan valores de composición muy similares a los experimentales, aunque no obstante, los valores de PCI están dentro de los valores típicos que se obtienen experimentalmente en procesos de gasificación de biomasa ($4-7 \text{ MJ/Nm}^3$) [19]. Sin embargo, el PCI calculado según el modelo cinético es inferior en todo el rango de temperaturas por culpa de la baja composición de CH_4 , puesto que la composición de H_2 y CO están más cerca de sus rangos normales en las instalaciones experimentales. Una posible causa a la obtención de la baja composición de CH_4 puede ser

debido al cálculo de una baja velocidad de reacción de las reacciones que producen de CH_4 como $R2$ (*hydrogasificación*) y $R3$, o también, debido al cálculo de una alta velocidad de reacción de la reacción de combustión del metano ($R6$).

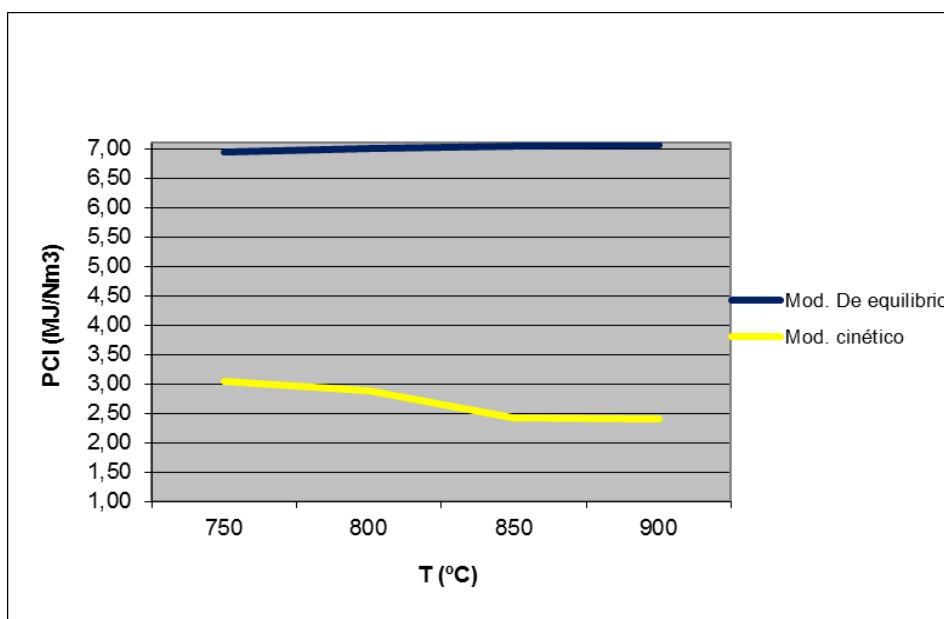


Figura 94. Evolución del PCI a la salida del lecho con la temperatura para $ER=0,25$ y $u_0/umf=1,2$.

Por otra parte, como ya se ha comentado en los análisis de sensibilidad, un aumento del dosado implica favorecer las reacciones de combustión homogéneas, y por lo tanto, que se sucedan en mayor medida que las reacciones de gasificación heterogéneas. En consecuencia, el contenido en CO_2 aumenta mientras disminuyen el contenido en H_2 , CO y CH_4 con respecto al dosado para ambos modelos como muestran las figuras 95, 96, 97, 98. También, en la figura 95 se observa como los valores de composición de H_2 arrojados por el modelo de equilibrio son mayores que los valores de composición de H_2 arrojados por el modelo cinético con respecto al dosado, consecuencia, como ya se ha explicado antes, de la diferencia de los modelos implementados, de tal manera que en el modelo de equilibrio no hace falta conocer los mecanismos cinéticos de conversión de la biomasa, en consecuencia, no se han incorporado reacciones como la combustión del carbón, ni reacciones típicas que consumen H_2 como $R3$ con las que se obtendrían valores mas similares a los experimentales, como en el caso del modelo cinético. También, en la figura 96 se observa como la caída de la composición de CO con respecto al dosado para el modelo de equilibrio es mayor que para el modelo cinético, posiblemente, a causa del mayor efecto que supone la reacción de combustión del CO en el modelo de equilibrio que en el modelo cinético. Después, en la figura 97, se observa como la composición de CH_4 desciende con respecto al dosado para ambos modelos, de la misma manera tal y como

muestra la experimentación. Como ya se ha comentado anteriormente, los valores de composición según el modelo cinético son muy bajos debido a la baja velocidad de reacción de las reacciones que producen de CH_4 como $R2$ (*hydrogasificación*) y $R3$, o también, debido al cálculo de una alta velocidad de reacción de la reacción de combustión del metano ($R6$). Finalmente, en la *figura 98* se puede observar la similitud de los resultados arrojados de ambos modelos en la composición de CO_2 con respecto al dosado.

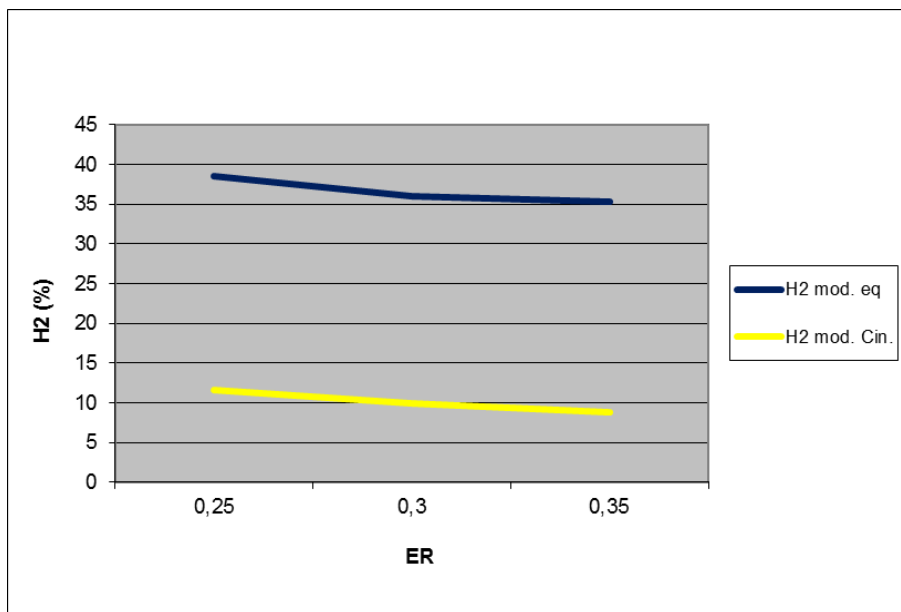


Figura 95. Evolución de la composición de H_2 a la salida del lecho con el dosado para $T=800^\circ\text{C}$ y $u_0/u_{mf}=1,2$.

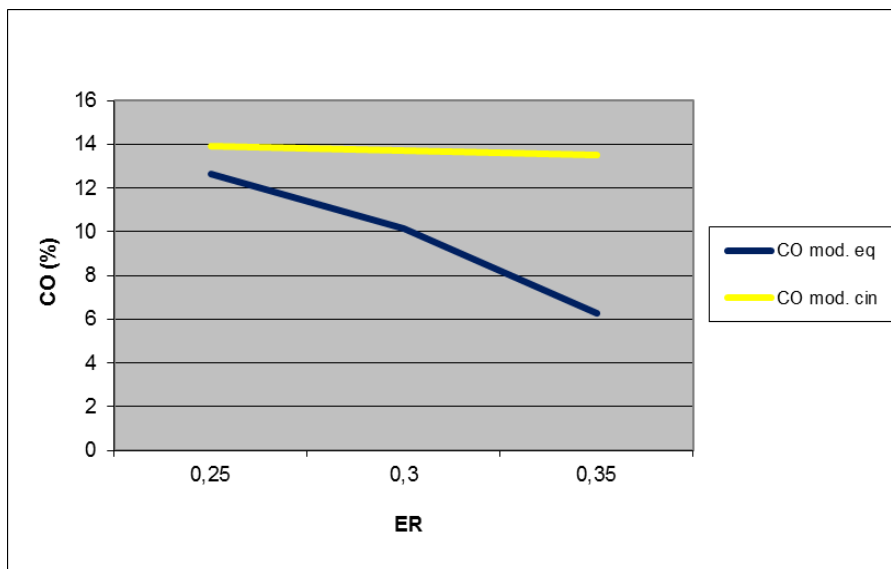


Figura 96. Evolución de la composición de CO a la salida del lecho con el dosado para $T=800^\circ\text{C}$ y $u_0/u_{mf}=1,2$.

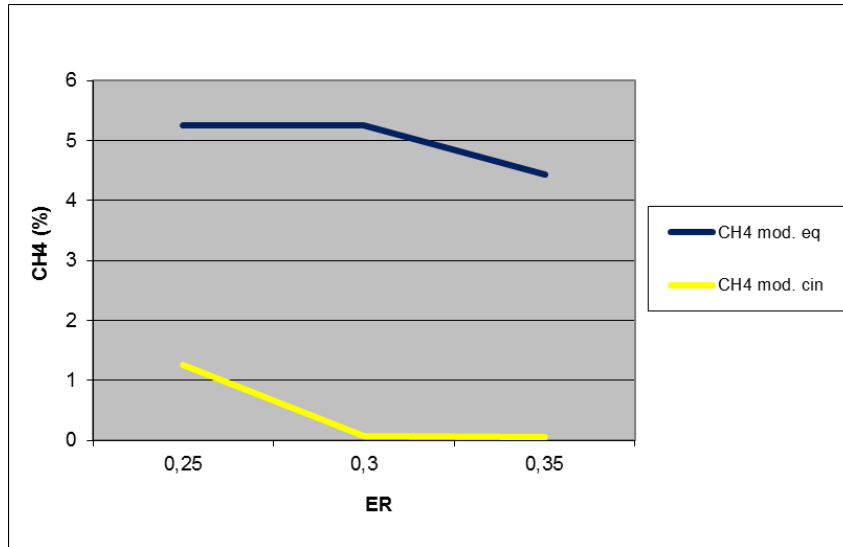


Figura 97. Evolución de la composición de CH_4 a la salida del lecho con el dosado para $T=800^\circ\text{C}$ y $u_0/u_{mf}=1,2$.

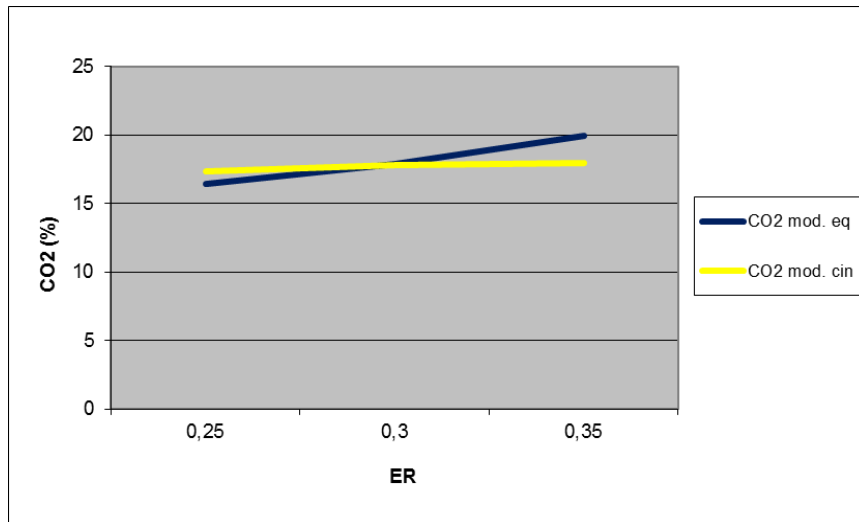


Figura 98. Evolución de la composición de CO_2 a la salida del lecho con el dosado para $T=800^\circ\text{C}$ y $u_0/u_{mf}=1,2$.

Después, en la *figura 99*, se observa como para el modelo de equilibrio la conversión de biomasa alcanza un optimo en torno a 0,3 de la misma manera tal y como ocurre en la experimentación [25] [26], aunque los valores de conversión de biomasa no están dentro de los valores típicos de conversión de biomasa (60-90%) [12] consecuencia de no tener en cuenta la reacción de combustión del carbono. Sin embargo, no sucede así para el modelo cinético, en donde si se tiene en cuenta la reacción de combustión del carbono, de tal manera que la conversión de biomasa aumenta con respecto el dosado y los valores de conversión de biomasa si están dentro los valores típicos de conversión.

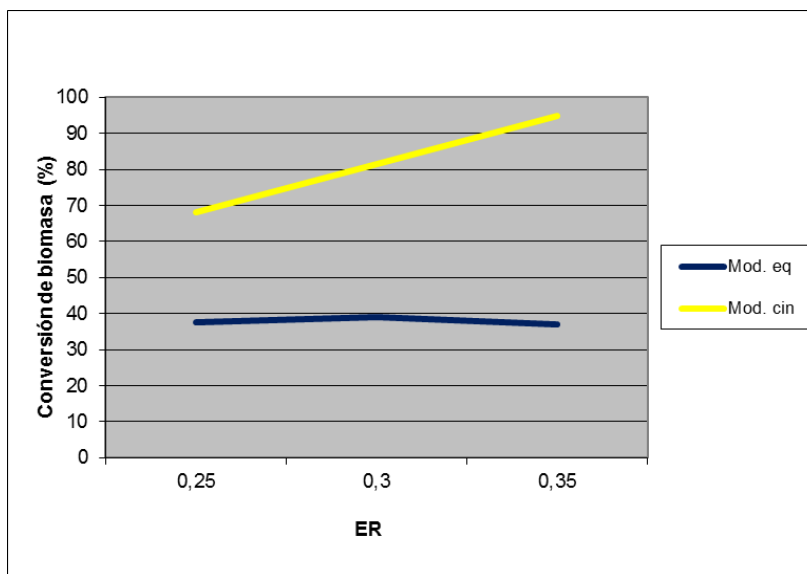


Figura 99. Evolución de la conversión de biomasa a la salida del lecho con el dosado para $T=800^{\circ}\text{C}$ y $u_0/u_{mf}=1,2$.

Por último, como era de esperar, la *figura 100* muestra el descenso del PCI con respecto al dosado para ambos modelos, debido también, al descenso de los gases de síntesis (H_2 , CO y CH_4) con respecto al dosado en ambos modelos. Al igual que sucedía en el análisis comparativo de ambos modelos con respecto a la temperatura, el PCI obtenido en el modelo de equilibrio es algo superior con respecto a nuestros resultados experimentales debido a la alta composición de H_2 obtenido, aunque no obstante, los valores de PCI están dentro de los valores típicos que se obtienen experimentalmente en procesos de gasificación de biomasa: $4\text{--}7 \text{ MJ/Nm}^3$ [19]. Sin embargo, el PCI calculado según el modelo cinético es inferior en todo el rango de dosado a consecuencia de la baja composición de CH_4 .

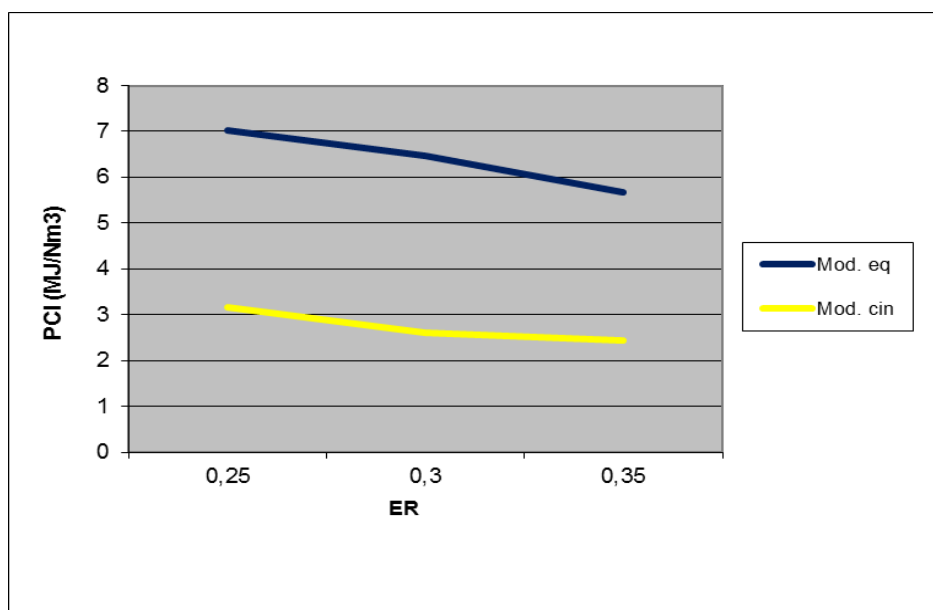


Figura 100. Evolución del PCI a la salida del lecho con el dosado para $T=800^{\circ}\text{C}$ y $u_0/u_{mf}=1,2$.

5. CONCLUSIONES

El principal objetivo y alcance del proyecto es el modelado de un gasificador de biomasa en lecho fluidizado a partir del desarrollo de dos aplicaciones: una aplicación basado en un modelo de equilibrio termodinámico, y otra aplicación basada en un modelo cinético, con el objetivo de utilizarlo como herramienta de simulación para analizar distintos casos prácticos de utilidad en el campo de investigación y a nivel comercial. Como ya se ha comentado al respecto en el *capítulo 4. Simulaciones Resultados*, en este proyecto no se obtienen resultados experimentales para los modelos presentados, de manera que entre las numerosas fuentes existentes se han seleccionado varias a las que se adaptan los modelos implementados (por el tipo de gasificación utilizada, y la similitud de las condiciones de operación), con las cuales se ha verificado el carácter predictivo de los modelos cinético y de equilibrio propuestos en el presente PFC.

Por otro lado, los parámetros seleccionados cumplen satisfactoriamente su función de actuar como puntos de control para una verificación del modelo, siguiendo las tendencias generales de las referencias utilizadas, y así, obtener las siguientes conclusiones de las simulaciones realizadas:

En primer lugar, un aumento del *Equivalence Ratio* (dosado) se traduce en aumentar la tendencia a combustión, obteniendo mayor cantidad de CO₂ (16%-20%) y menor cantidad de CO [(6%-12%) en modelo de equilibrio; (13%-14%) en modelo cinético], H₂ [(33%-38%) en modelo de equilibrio, (8%-13%) en modelo cinético] y CH₄ [(4%-6%) en modelo de equilibrio, (0%-1,5%) en modelo cinético], en consecuencia, el PCI disminuye [(5,4-7,06 MJ/Nm³) en modelo de equilibrio, y entre (0,7-3,33 MJ/Nm³) en modelo cinético]. También, se obtiene una mayor conversión de biomasa con el aumento del dosado (38%-40% en modelo de equilibrio, 65%-95% en modelo cinético), puesto que se favorece la combustión de la biomasa.

En segundo lugar, de los resultados arrojados por el modelo cinético, llegamos a la conclusión que un aumento del *Estado de Fluidización* (u_0/u_{mf}) implica una disminución del tiempo de residencia del aire en la zona de reacción y por tanto una disminución del contacto gas-sólido que afecta de la siguiente manera: Se produce una disminución relativa de la influencia de las reacciones heterogéneas de gasificación con respecto a las reacciones homogéneas de combustión, de manera que se sucede una disminución de los gases de síntesis [CO(6%-14%); H₂(12%-4%); CH₄(0%-1,5%)], del PCI (0,7-3,33 MJ/Nm³) y de la conversión de biomasa (25%-95%). También, se puede llegar a la

conclusión que a partir de un valor en torno a $u_0/u_{mf}=3$, se produce la combustión casi total del CH_4 debido a la mayor influencia de la reacción de combustión del metano sobre la reacción de *hydrogasificación* (producción de CH_4), en consecuencia, provoca que se suceda en mayor medida la reacción de combustión del carbono por exceso de oxígeno.

En tercer lugar, de acuerdo al modelo de equilibrio, un aumento de la *Temperatura* en el proceso favorece la conversión de biomasa (37%-39%), una mayor producción de CO (6%-20%) y H_2 (33%-38%), y una disminución de CH_4 (3%-8%), en consecuencia, el PCI aumente ligeramente (6,95-7,06 MJ/Nm³) siendo positivo desde el punto de vista energético. Sin embargo, de acuerdo al modelo cinético, sucede que un aumento de la temperatura en el proceso favorece la conversión de biomasa (65%-78%), pero no favorece una mayor producción de gas de síntesis aprovechable (0,7-3,33 MJ/Nm³).

Por lo tanto, las condiciones óptimas teóricas de acuerdo al modelo de equilibrio son: $T=900^\circ\text{C}$, $\text{ER}=0,25$; con un valor de $\text{PCI}=7,06 \text{ MJ/Nm}^3$ y una conversión de biomasa del 39,72%. Y de acuerdo al modelo cinético: $T=750^\circ\text{C}$, $\text{ER}=0,25$; y $u_0/u_{mf}=1,2$, con un valor de $\text{PCI}=3,33 \text{ MJ/Nm}^3$ y una Conversión de biomasa del 63,72%.

Finalmente, se puede concluir que el modelo de equilibrio es una herramienta que arroja resultados coherentes de una manera relativamente sencilla y rápida, ya que las tendencias generales de los resultados en cuanto a composición de gas de síntesis, conversión de biomasa y PCI son muy similares a los resultados experimentales. No obstante, hay que tener en cuenta que los valores arrojados de conversión de biomasa son bajos, al igual que los valores de composición de H_2 son elevados con respecto a los resultados experimentales, a causa principalmente del modelo empleado, basado en el equilibrio termodinámico de las especies reaccionantes presentes en el sistema, de tal manera que las reacciones consideradas en el sistema y el orden de dichas reacciones son muy influyentes en los resultados obtenidos. Por otro lado, el modelo cinético es más complejo de implementar, pero al estar basado en la cinética del gas, permite realizar estudios más complejos que tengan en cuenta más fenómenos existentes en la realidad. Por ejemplo, el modelo cinético considera u_0/u_{mf} , al contrario que el modelo de equilibrio, que no lo tiene en cuenta. El modelo cinético arroja resultados coherentes en cuanto a composición de H_2 , CO y conversión de biomasa, pero considerando que la composición de CH_4 es baja con respecto a la obtenida experimentalmente, a causa principalmente de la mayor influencia de la reacción combustión del metano frente a las reacciones que producen de CH_4 como $R2$ (*hydrogasificación*) y $R3$.

Para terminar, se puede decir que los modelos de simulación pueden servir a un fabricante como punto de partida de un proyecto para la instalación de un gasificador de biomasa en una zona determinada, a modo de orientación sobre la producción de gas de síntesis para su posterior venta y utilización.

5.1 Líneas Futuras

Seguramente, para obtener mejores resultados, se necesitaría implementar un modelo más descriptivo de la realidad en el modelo cinético (etapa crítica en el modelado de este tipo de reactores) incluyendo mayor número de reacciones y evaluar los órdenes de magnitud de las velocidades de reacción, y así poder examinar la importancia relativa de cada una de ellas.

De la misma manera, para una posible mejora de acuerdo al modelo de equilibrio, se necesitaría implementar mayor número de reacciones y realizar simulaciones con diferentes órdenes de reacción según el método de relajación empleado. Por ejemplo, en nuestro modelo de equilibrio hemos ordenado las reacciones tenidas en cuenta según la velocidad de reacción inicial de cada reacción, de tal manera que las reacciones de combustión homogéneas están implementadas en las primeras posiciones seguidas de las reacciones heterogéneas de gasificación, por lo tanto, sería interesante realizar distintas simulaciones teniendo en cuenta mas reacciones y también cambiando el orden de las reacciones para ver que resultados arroja en modelo.

Por otro lado, sería de gran interés la realización de ensayos en la instalación ubicada en la nave de térmica de la Universidad Carlos III de Madrid con el fin de obtener resultados experimentales. Este análisis servirá para una validación y obtención de conclusiones orientadas al funcionamiento de los modelos cinético y de equilibrio aplicado a prototipos.

También, Ampliación de los modelos de equilibrio y cinético a la zona inmediatamente superior a la de reacción, denominada “freeboard”. Mejora del código para la convergencia de la solución, probablemente realizable en menor número de iteraciones.

6. REFERENCIAS

- [1] Ambientum. www.ambientum.com/enciclopedia/energia
- [2] Equinox. Overseas investment Ltd. <http://eqnxcorp.com/expertise.htm>
- [3] Aden, A., Ruth, M., Ibsen, K., Jechura, J. *Lignocellulosic. Biomass to ethanol process design and economics utilizing co-cocurrent dilute acid prehydrolysis and enzymatic hydrolysis for corn Stover*. 2002.
- [4] Kunii D, Levenspiel O. *Fluidization Engineering*, 2nd ed. Boston: Butterworth-Heinemann. 1991. vol. 17, pp 1-95
- [5] Peter McKendry. *Energy production from biomass: Overview of biomass. Bioresource Technolog*. 2002, pp. 37– 46.
- [6] Wilfredo Evenor Velazquez Mejía. *Energías renovables*. Biomasa. 2009.
- [7] Safitri, A. *Biomass gasification using bubbling fluidized-bed gasifier: investigation of the effect of the different catalysts on tar reduction*. Master of Science Thesis, 2005.
- [8] Pengmei LU, Xiaoying KONG, Chuangzhi WU, Zhenhong YUAN. *Modeling and simulation of biomass air-steam gasification in a fluidized bed*. *Font Chem. Eng. China* 2008, 2(2): pp 209–213.
- [9] BP Statistical Review of World Energy. June 2009.
- [10] Ballesteros, M. *Curso de formación del profesorado en el área de las energías renovables*. Biomasa. CIEMAT. 2001.
- [11] Basu, P. *Combustion and Gasification in Fluidized Beds*. 2006.
- [12] Higman C., Van der Burgt M. *Gasification*. Elsevier. 2003.
- [13] Bull, D. *Performance Improvements to a Fast Internally Circulating Fluidized Bed (FICFB) Biomass Gasifier for Combined Heat and Power Plants*. University of Canterbury, 2008.
- [14] I. Petersen, J. Werther. *Experimental investigation and modeling of gasification of sewage sludge in the circulating fluidized bed*. *Technical University Hamburg-Harburg*. 2004.
- [15] Loison, R. and Chauvin, R. *Pyrolyse rapide du charbon*. *Chimie et Industrie*, 1964, vol. 91, pp 269.
- [16] Yan, H. Heidenreich, C. Zhang, D. *Mathematical modelling of a bubbling fluidised-bed coal gasifier and the significance of 'net flow'*. Elsevier. 1997.

- [17] Peijun, Ji. WeiFeng. Biaohua, Chen. *Production of ultrapure hydrogen from biomass gasification with air. State Key Laboratory of Chemical Resource Engineering, Beijing University of Chemical Technology*. Beijing 100029, China.
- [18] Toomey & Johnstone. *Gas-solid contact in fluidized beds*. 1950.
- [19] Mori, S. and Wen, C. Y., *AIChE J.*, 1975, 21, 109-115.
- [20] García, A. *Gasificación de biomasa para producción de combustibles de bajopoder calorífico y su utilización en generación de potencia y calor. Universidad de Buenaventura*. 2009.
- [21] Yogi Goswami. "Alternative Energy in Agriculture". Vol. II, Ed. D., CRC Press, 1986, pp. 83-102.
- [22] Corella, J., Narváez, I., Aznar, M. P., Orio. *Biomass Gasification with Air in an Atmospheric Bubbling Fluidized Bed. Effect of Six Operational Variables on the Quality of the Produced Raw Gas*. *Ing. Eng. Chem. Res.*, 1996, vol. 35, pp 2110-2120.
- [23] Avdhesh, Kr. Sharma. *Equilibrium and kinetic modeling of char reduction reactions in a downdraft biomass gasifier. A comparison*. www.sciencedirect.com, 2008.
- [24] Mahecha, Andrés Botero. John Grace, R., C. Jim Lim. SSEH. Elnashaie. Tony Boyd, y Gulamhusein Ali. "Generación de Hidrógeno puro en un reactor de lecho fluidizado de membrana: Aplicación del Modelo Integral de Reactor generalizada". *Chem. Eng. Ciencia*. 2009, 64, 17, pp 3826-3896 (2009).
- [25] Kumar, A., Jones, D., Hanna, M. *Thermochemical Biomass Gasification: A Review of the Current Status of the Technology*. *Energies* 2009, vol2, pp556-581.
- [26] Gómez Barea, A., Arjona, R., Ollero, P. *Pilot-Plant Gasification of Olive Stone: a Technical Assessment. Energy & Fuels*. 2005, vol. 19, pp 598-605.
- [27] Calleja, G. y col. "Introducción a la Ingeniería Química". Ed. Síntesis. Madrid. (1999).
- [28] Ergun, S., & Orning, A. A. (1949). *Fluid flow through randomly packed columns and fluidized beds*. *Industrial and Engineering Chemistry*, 41(8), 1179–1184.
- [29] M. W. Chase, J. L. Curnut, A. T. Hu, H. Prophet, A. N. Siverud, L. C. Walker. *JANAF thermochemical tables, 1974 suplement*. Thermal Research, The Dow Chemical company. Midland, Michigan.

7. NOMENCLATURA

$a_1...a_5$	Concentraciones referenciadas a un reactante
a_B	Área de transferencia entre las fases burbuja y emulsión ($m^2 m^{-3}$)
a_s	Área específica de las partículas ($m^2 m^{-3}$)
A	Área transversal del reactor (m^2)
Δ_{FE}	Flujo neto total entre fases ($mol m^{-3} s^{-1}$)
Δ_{FEi}	Flujo neto del componente i entre fases ($mol m^{-3} s^{-1}$)
C_p	Calor específico ($J Kg^{-1} K^{-1}$)
C	Concentración de gas ($mol m^{-3}$)
D	Diámetro del reactor (m)
D_{B0}	Diámetro inicial de burbuja (m)
D_{BM}	Diámetro máximo teórico de burbuja (m)
d_b	Diámetro de burbuja (m)
d_p	Diámetro de partícula (m)
D_g	Difusividad del gas ($m^2 s^{-1}$)
ER	Equivalence Ratio - Dosado
f	Flujo de gas ($mol s^{-1}$)
F	Flujo neto ($mol m^{-3} s^{-1}$)
grav	Aceleración de la gravedad ($m^2 s^{-1}$)
G_r	Energía libre de Gibbs de cada reacción ($J mol^{-1}$)
H	Entalpía ($J mol^{-1}$)
k	Coefficiente de transferencia de masa ($m^3 m^{-2} s^{-1}$)
K_{eq}	Constante de equilibrio
K_{BE}	Coefficiente de transferencia de masa entre fases
L/D	Relación de esbeltez
L	Altura de lecho sobre distribuidor (m)
m	Caudal másico ($Kg s^{-1}$)
n_{pisos}	Número de pisos
n_d	Número de agujeros del distribuidor
$n_1...n_4$	Parámetros de la correlación JANAF
PCI	Poder calorífico inferior ($MJ N^{-1} m^{-3}$)
PM	Peso molecular ($Kg mol^{-1}$)
Q	Caudal ($m^3 s^{-1}$)

r	Velocidad de reacción ($\text{mol m}^{-3} \text{s}^{-1}$)
R	Constante universal de los gases ($\text{J mol}^{-1} \text{K}^{-1}$)
R_{tchar}	Contribución neta de reacciones heterogéneas ($\text{mol m}^{-3} \text{s}^{-1}$)
S	Entropía (J mol^{-1})
T	Temperatura de reacción (K)
T_{op}	Temperatura de operación (K)
T_{ref}	Temperatura de referencia (K)
u_0	Velocidad superficial del gas (m s^{-1})
u_{mf}	Velocidad mínima de fluidización (m s^{-1})
u_{ex}	Velocidad exceso (m s^{-1})
u_b	Velocidad de burbuja (m s^{-1})
V_{VC}	Volumen de control (m^3)
X_c	Conversión del carbono
X_{mv}	Fracción másica volátil de la biomasa
x	Estado de fluidización
y	Conversión de especie reactante elegida de referencia
z	Altura sobre el distribuidor de aire (m)

Letras griegas

α_{ij}	Coefficiente estequiométrica de la especie i en la reacción j
ε_b	Fracción de volumen de la fase burbuja
ε_{mf}	Fracción de volumen de burbuja en la fase de emulsión
ρ_g	Densidad del fluido (Kg m^{-3})
ρ_s	Densidad de las partículas del lecho (Kg m^{-3})
φ_s	Esfericidad
ε_{mf}	Porosidad del lecho
ε_f	Fracción de vacío

Subíndices

B	Fase Burbuja
E	Fase Emulsión
i	Especies de gas
j	Índice de reacción
c	Combustión

g	Gasificación
v	Volatilización
s	Específico
ex	Exceso
op	Operación
ref	Referencia
eq	Equilibrio

8. ANEXOS

Anexo 1

Tipo de partícula	Esfericidad
Esférica	1
Cúbica	0,81
<i>Cilíndrica</i>	
h=d	0,87
h=5d	0,7
h=10d	0,58
Discos	
h=3/d	0,76
h=6/d	0,6
h=10/d	0,47
Carbón activado y sílice	0,7-0,9
sólidos rotos	0,63
<i>Combustibles</i>	
Antracita	0,63
Bituminoso	0,63
Vidrio	0,65
Mica	0,28
tusteno	0,89
trigo	0,85
<i>Arena</i>	
redonda	0,86
dura	0,66
playa	0,86
rio	0,53

Tabla 26. Esfericidad en función del tipo de partícula. [4]

Anexo 2

Tipo de partícula	d_p (mm)						
	0,02	0,05	0,07	0,1	0,2	0,3	0,4
Arena dura, $\phi_s = 0.67$	—	0,6	0,59	0,58	0,54	0,5	0,49
Arena redonda, $\phi_s = 0.86$	—	0,56	0,52	0,48	0,44	0,42	—
Mezcla arena redonda	—	—	0,42	0,42	0,41	—	—
Carbón y polvo de vidria	0,72	0,67	0,64	0,62	0,57	0,56	—
Carbón de antracita, $\phi_s = 0.63$	—	0,62	0,61	0,6	0,56	0,53	0,51
Absorption carbon	0,74	0,72	0,71	0,69	—	—	—
Fischer-Tropsch catalyst $\phi_s = 0.58$	—	—	—	0,58	0,56	0,55	—
Carborundum	—	0,61	0,59	0,56	0,48	—	—

Tabla 27. Porosidad del lecho en función de la forma y diámetro de las partículas del lecho. [4]

La esfericidad de las partículas y la porosidad del lecho están relacionadas. La *figura 101* muestra los datos típicos de fracción de huecos para lechos de relleno. La fracción de huecos disminuye a medida que la esfericidad aumenta.

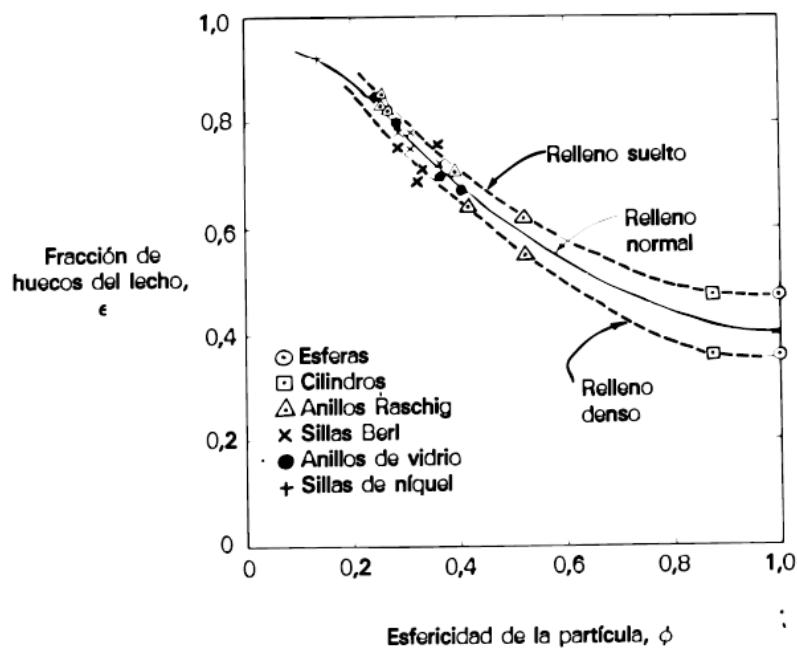


Figura 101. Fracción de huecos en función de la esfericidad de la partícula [27]

Anexo 3

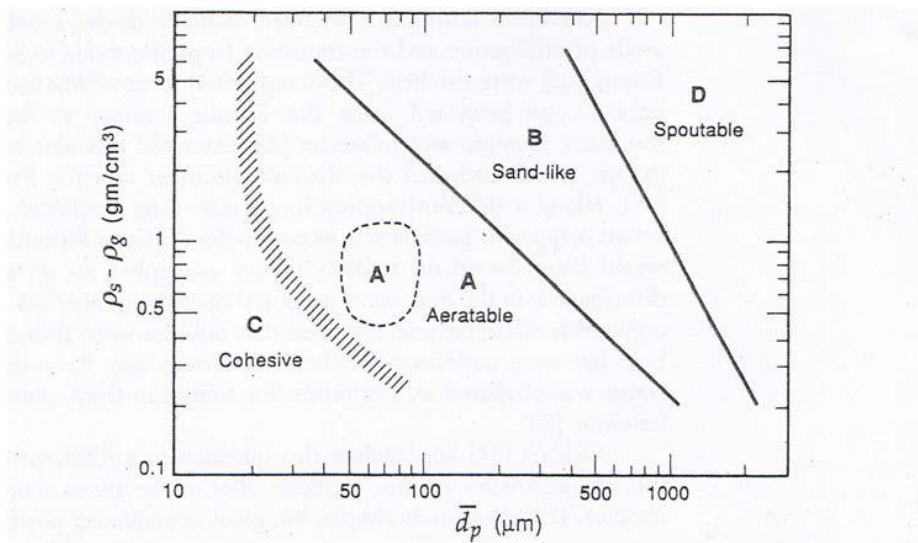


Figura 102. Diagrama de Geldart [4]

Geldart[4] identificó cuatro tipos de partículas del lecho con propiedades determinantes del tipo de fluidización más adecuada, en función del diámetro de partícula y la diferencia de densidad relativa entre la fase fluida y las partículas sólidas. La *figura 102* muestra la clasificación, separados en función de su densidad frente al diámetro de partículas que presentan.

Grupo A. Adecuadas para lecho fluidizado burbujeante, por su facilidad de fluidizar con corrientes a baja velocidad. El lecho se expande considerablemente antes de que aparezcan las burbujas, hasta un tamaño menor que 10 cm. Aparece alta circulación de sólidos.

Grupo B. Las partículas son más gruesas y densas (arenosas) que las del grupo A. Forman burbujas al superar levemente u_{mf} , con tamaños independientes del tamaño de partícula del lecho.

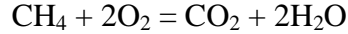
Grupo C. Presentan dificultad para fluidizar y tienden a crecer como pisos de sólidos (tipo flujo pistón), formando canalizaciones en grandes lechos sin fluidizar. Cohesivos.

Grupo D. Partículas densas y de gran tamaño, por lo que son difíciles de fluidizar, puesto que se necesitarían grandes corrientes con velocidades muy elevadas. Forman burbujas que coalescen rápidamente, aunque crecen más lentamente que el resto de la fase gaseosa.

Anexo 4

Ejemplo con la reacción R6. Combustión del metano.

Es la reacción con la mayor Constante de Equilibrio de todas las reacciones consideradas. Será la primera de todas en modelizar.



Un mol de CH_4 reacciona con 2 moles de O_2 . Para dar como resultado 1 mol de CO_2 y 2 moles de H_2O . Por tanto:

Si $0.5 \cdot f_{\text{CH}_4} > f_{\text{O}_2}$, entonces el reactante limitante es el O_2 y la cantidad de moles de los productos son:

$$f_{\text{CO}_2\text{out}} = f_{\text{CO}_2\text{in}} + 0.5 \cdot f_{\text{O}_2\text{in}}$$

$$f_{\text{H}_2\text{Oout}} = f_{\text{H}_2\text{Oin}} + f_{\text{O}_2\text{in}}$$

$$f_{\text{CH}_4\text{out}} = f_{\text{CH}_4\text{in}} - 0.5 \cdot f_{\text{O}_2\text{in}}$$

$$f_{\text{O}_2\text{out}} = f_{\text{O}_2\text{in}} - f_{\text{O}_2\text{in}}$$

Por el contrario si $0.5 \cdot f_{\text{CH}_4} < f_{\text{O}_2}$, entonces el reactante limitante es el CH_4 y la cantidad de moles de los productos son:

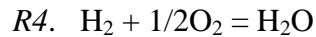
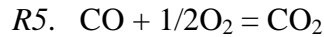
$$f_{\text{CO}_2\text{out}} = f_{\text{CO}_2\text{in}} + f_{\text{CH}_4\text{in}}$$

$$f_{\text{H}_2\text{Oout}} = f_{\text{H}_2\text{Oin}} + 2 \cdot f_{\text{CH}_4\text{in}}$$

$$f_{\text{O}_2\text{out}} = f_{\text{O}_2\text{in}} - 2 \cdot f_{\text{CH}_4\text{in}}$$

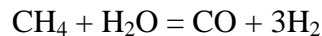
$$f_{\text{CH}_4\text{out}} = f_{\text{CH}_4\text{in}} - f_{\text{CH}_4\text{in}}$$

Para las 2 siguientes reacciones directas.



El proceso de modelización es el mismo explicado para la reacción R6.

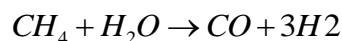
Ejemplo con la reacción R9.



Primeramente calculamos las concentraciones de cada especie dividiendo el gasto de moles entre el caudal.

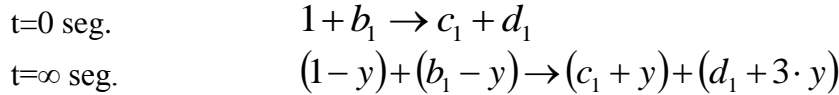
$$[f_{\text{CH}_4}] = \frac{f_{\text{CH}_4}}{Q} \quad [f_{\text{H}_2\text{O}}] = \frac{f_{\text{H}_2\text{O}}}{Q} \quad [f_{\text{CO}}] = \frac{f_{\text{CO}}}{Q} \quad [f_{\text{H}_2}] = \frac{f_{\text{H}_2}}{Q}$$

Si $K_{eq} \cdot [f_{\text{CH}_4}] \cdot [f_{\text{H}_2\text{O}}] > [f_{\text{CO}}] \cdot [f_{\text{H}_2}]^3$, entonces el sentido de la reacción es:



Dividimos las concentraciones por uno de los dos reactantes:

$$a_1 = \frac{[f_{\text{CH}_4}]}{[f_{\text{CH}_4}]} = 1 \quad b_1 = \frac{[f_{\text{H}_2\text{O}}]}{[f_{\text{CH}_4}]} \quad c_1 = \frac{[f_{\text{CO}}]}{[f_{\text{CH}_4}]} \quad d_1 = \frac{[f_{\text{H}_2}]}{[f_{\text{CH}_4}]}$$



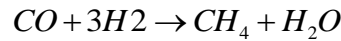
Donde “y” es el número de moles transformados de CH₄ dividido entre el número de moles totales de CH₄. Despejamos “y” de la ecuación:

$$Keq = \frac{[c_1 + y] \cdot [d_1 + 3 \cdot y]^3}{[1 - y] \cdot [b_1 - y]}$$

Los moles de salida de las especies son:

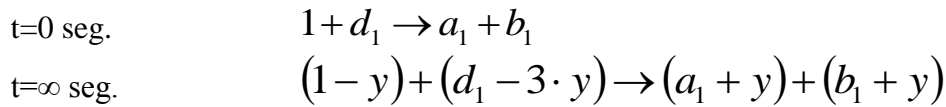
$$\begin{aligned}
 f_{CH_4}out &= f_{CH_4}in - y \cdot f_{CH_4}in \\
 f_{H_2O}out &= f_{H_2O}in - y \cdot f_{CH_4}in \\
 f_{CO}out &= f_{CO}in + y \cdot f_{CH_4}in \\
 f_{H_2}out &= f_{H_2}in + y \cdot 3 \cdot f_{CH_4}in
 \end{aligned}$$

Si por el contrario $Keq \cdot [f_{CH_4}] \cdot [f_{H_2O}] < [f_{CO}] \cdot [f_{H_2}]^3$, entonces el sentido de la reacción es:



Dividimos las concentraciones por uno de los dos reactantes:

$$a_1 = \frac{[f_{CH_4}]}{[f_{CO}]} \quad b_1 = \frac{[f_{H_2O}]}{[f_{CO}]} \quad c_1 = \frac{[f_{CO}]}{[f_{CO}]} = 1 \quad d_1 = \frac{[f_{H_2}]}{[f_{CO}]}$$



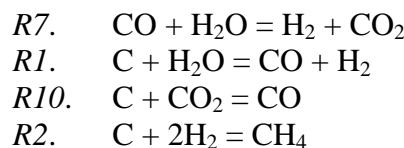
Donde “y” es el número de moles transformados de CH₄ dividido entre el número de moles totales de CH₄. Despejamos “y” de la ecuación:

$$\frac{1}{Keq} = \frac{[a_1 + y] \cdot [b_1 + y]}{[1 - y] \cdot [d_1 - 3 \cdot y]^3}$$

En este caso los moles de salida de las especies son:

$$\begin{aligned}
 f_{CH_4}out &= f_{CH_4}in + y \cdot f_{CO}in \\
 f_{H_2O}out &= f_{H_2O}in + y \cdot f_{CO}in \\
 f_{CO}out &= f_{CO}in - y \cdot f_{CO}in \\
 f_{H_2}out &= f_{H_2}in - y \cdot 3 \cdot f_{CO}in
 \end{aligned}$$

Para las siguientes ecuaciones seguiremos el mismo procedimiento para su modelado.



Anexo 5

Temperatura (°C)	Equivalence Ratio		
	0,25	0,3	0,35
750	Simulación 1	Simulación 2	Simulación 3
800	Simulación 4	Simulación 5	Simulación 6
850	Simulación 7	Simulación 8	Simulación 9
900	Simulación 10	Simulación 11	Simulación 12

Tabla 27. Simulaciones realizadas con el modelo de equilibrio.

Para $u_o/u_{mf}=1,2$		Equivalence Ratio		
Temperatura (°C)		0,25	0,3	0,35
750		Simulación 1	Simulación 2	Simulación 3
800		Simulación 4	Simulación 5	Simulación 6
850		Simulación 7	Simulación 8	Simulación 9
900		Simulación 10	Simulación 11	Simulación 12

Para $u_o/u_{mf}=3$		Equivalence Ratio		
Temperatura (°C)		0,25	0,3	0,35
750		Simulación 13	Simulación 14	Simulación 15
800		Simulación 16	Simulación 17	Simulación 18
850		Simulación 19	Simulación 20	Simulación 21
900		Simulación 22	Simulación 23	Simulación 24

Para $u_o/u_{mf}=6$		Equivalence Ratio		
Temperatura (°C)		0,25	0,3	0,35
750		Simulación 25	Simulación 26	Simulación 27
800		Simulación 28	Simulación 29	Simulación 30
850		Simulación 31	Simulación 32	Simulación 33
900		Simulación 34	Simulación 35	Simulación 36

Tabla 28. Simulaciones realizadas con el modelo cinético.

Anexo 6

$\frac{df_{BO_2}}{dz} = A[a_B k_{BE} (C_{EO_2} - C_{BO_2}) + \Delta F_{EO_2} + \varepsilon_b \cdot (\alpha_{O_2 4} r_4 + \alpha_{O_2 5} r_5 + \alpha_{O_2 6} r_6 + \alpha_{O_2 7} r_7)]$
$\frac{df_{BH_2}}{dz} = A[a_B k_{BE} (C_{EH_2} - C_{BH_2}) + \Delta F_{EH_2} + \varepsilon_b \cdot (\alpha_{H_2 4} r_4 + \alpha_{H_2 5} r_5 + \alpha_{H_2 6} r_6 + \alpha_{H_2 7} r_7)]$
$\frac{df_{BH_2O}}{dz} = A[a_B k_{BE} (C_{EH_2O} - C_{BH_2O}) + \Delta F_{EH_2O} + \varepsilon_b \cdot (\alpha_{H_2O 4} r_4 + \alpha_{H_2O 5} r_5 + \alpha_{H_2O 6} r_6 + \alpha_{H_2O 7} r_7)]$
$\frac{df_{BCO_2}}{dz} = A[a_B k_{BE} (C_{ECO_2} - C_{BCO_2}) + \Delta F_{ECO_2} + \varepsilon_b \cdot (\alpha_{CO_2 4} r_4 + \alpha_{CO_2 5} r_5 + \alpha_{CO_2 6} r_6 + \alpha_{CO_2 7} r_7)]$
$\frac{df_{BCO}}{dz} = A[a_B k_{BE} (C_{ECO} - C_{BCO}) + \Delta F_{ECO} + \varepsilon_b \cdot (\alpha_{CO 4} r_4 + \alpha_{CO 5} r_5 + \alpha_{CO 6} r_6 + \alpha_{CO 7} r_7)]$
$\frac{df_{BCH_4}}{dz} = A[a_B k_{BE} (C_{ECH_4} - C_{BCH_4}) + \Delta F_{ECH_4} + \varepsilon_b \cdot (\alpha_{CH_4 4} r_4 + \alpha_{CH_4 5} r_5 + \alpha_{CH_4 6} r_6 + \alpha_{CH_4 7} r_7)]$
$\frac{df_{BN_2}}{dz} = A[a_B k_{BE} (C_{EN_2} - C_{BN_2}) + \Delta F_{EN_2} + \varepsilon_b \cdot (\alpha_{N_2 4} r_4 + \alpha_{N_2 5} r_5 + \alpha_{N_2 6} r_6 + \alpha_{N_2 7} r_7)]$
$\begin{aligned} \frac{df_{EO_2}}{dz} = & A(a_B k_{BEi} (C_{EO_2} - C_{BO_2}) + \Delta F_{EO_2} + (1 - \varepsilon_b) \times [(\varepsilon_{mf} \cdot (\alpha_{O_2 4} r_4 + \alpha_{O_2 5} r_5 + \alpha_{O_2 6} r_6 + \alpha_{O_2 7} r_7)) \\ & + (1 - \varepsilon_{mf}) \times (a_s \alpha_{O_2 1} r_1 + a_s \alpha_{O_2 2} r_2 + a_s \alpha_{O_2 3} r_3 + a_s \alpha_{O_2 8} r_8)]) \end{aligned}$
$\begin{aligned} \frac{df_{EH_2}}{dz} = & A(a_B k_{BEi} (C_{EH_2} - C_{BH_2}) + \Delta F_{EH_2} + (1 - \varepsilon_b) \times [(\varepsilon_{mf} \cdot (\alpha_{H_2 4} r_4 + \alpha_{H_2 5} r_5 + \alpha_{H_2 6} r_6 + \alpha_{H_2 7} r_7)) \\ & + (1 - \varepsilon_{mf}) \times (a_s \alpha_{H_2 1} r_1 + a_s \alpha_{H_2 2} r_2 + a_s \alpha_{H_2 3} r_3 + a_s \alpha_{H_2 8} r_8)]) \end{aligned}$
$\begin{aligned} \frac{df_{EH_2O}}{dz} = & A(a_B k_{BEi} (C_{EH_2O} - C_{BH_2O}) + \Delta F_{EH_2O} + (1 - \varepsilon_b) \times [(\varepsilon_{mf} \cdot (\alpha_{H_2O 4} r_4 + \alpha_{H_2O 5} r_5 + \alpha_{H_2O 6} r_6 + \alpha_{H_2O 7} r_7)) \\ & + (1 - \varepsilon_{mf}) \times (a_s \alpha_{H_2O 1} r_1 + a_s \alpha_{H_2O 2} r_2 + a_s \alpha_{H_2O 3} r_3 + a_s \alpha_{H_2O 8} r_8)]) \end{aligned}$
$\begin{aligned} \frac{df_{ECO_2}}{dz} = & A(a_B k_{BEi} (C_{ECO_2} - C_{BCO_2}) + \Delta F_{ECO_2} + (1 - \varepsilon_b) \times [(\varepsilon_{mf} \cdot (\alpha_{CO_2 4} r_4 + \alpha_{CO_2 5} r_5 + \alpha_{CO_2 6} r_6 + \alpha_{CO_2 7} r_7)) \\ & + (1 - \varepsilon_{mf}) \times (a_s \alpha_{CO_2 1} r_1 + a_s \alpha_{CO_2 2} r_2 + a_s \alpha_{CO_2 3} r_3 + a_s \alpha_{CO_2 8} r_8)]) \end{aligned}$
$\begin{aligned} \frac{df_{ECO}}{dz} = & A(a_B k_{BEi} (C_{ECO} - C_{BCO}) + \Delta F_{ECO} + (1 - \varepsilon_b) \times [(\varepsilon_{mf} \cdot (\alpha_{CO 4} r_4 + \alpha_{CO 5} r_5 + \alpha_{CO 6} r_6 + \alpha_{CO 7} r_7)) \\ & + (1 - \varepsilon_{mf}) \times (a_s \alpha_{CO 1} r_1 + a_s \alpha_{CO 2} r_2 + a_s \alpha_{CO 3} r_3 + a_s \alpha_{CO 8} r_8)]) \end{aligned}$
$\begin{aligned} \frac{df_{ECH_4}}{dz} = & A(a_B k_{BEi} (C_{ECH_4} - C_{BCH_4}) + \Delta F_{ECH_4} + (1 - \varepsilon_b) \times [(\varepsilon_{mf} \cdot (\alpha_{CH_4 4} r_4 + \alpha_{CH_4 5} r_5 + \alpha_{CH_4 6} r_6 + \alpha_{CH_4 7} r_7)) \\ & + (1 - \varepsilon_{mf}) \times (a_s \alpha_{CH_4 1} r_1 + a_s \alpha_{CH_4 2} r_2 + a_s \alpha_{CH_4 3} r_3 + a_s \alpha_{CH_4 8} r_8)]) \end{aligned}$
$\begin{aligned} \frac{df_{EN_2}}{dz} = & A(a_B k_{BEi} (C_{EN_2} - C_{BN_2}) + \Delta F_{EN_2} + (1 - \varepsilon_b) \times [(\varepsilon_{mf} \cdot (\alpha_{N_2 4} r_4 + \alpha_{N_2 5} r_5 + \alpha_{N_2 6} r_6 + \alpha_{N_2 7} r_7)) \\ & + (1 - \varepsilon_{mf}) \times (a_s \alpha_{N_2 1} r_1 + a_s \alpha_{N_2 2} r_2 + a_s \alpha_{N_2 3} r_3 + a_s \alpha_{N_2 8} r_8)]) \end{aligned}$

Tabla 29. Sistemas de ecuaciones ADO

Anexo 7

```
% MODELO DE SIMULACIÓN EN MATLAB. MODELO DE EQUILIBRIO

% Parametros de funcionamiento
T=1073 % Temperaturas (°K)
ER=0.25; % Equivalence Ratio
vo_vmf=1.2; % Estado de fluidización
Tref=298; % Temperatura de referencia
Rg=8.3144; % Constante cinética de los gases (J/mol*K)
g=9.8; % Gravedad (m/s2)

%Propiedades del solido.
dp=1.25E-3; % Diámetro de las partículas (m)
Esf=0.67; % esfericidad
Emf=0.4; % porosidad
d_solid=2650; %Densidad de las particulas (Kg/m3)

% Propiedades del Aire
d_aire=(355.91)*(T^(-1.0032)) % Densidad del aire [kg/m3]
Vis_aire=(3E-07)*(T^(0.7218)) % Viscosidad dinámica del
aire[kg/(m*s)]

% Velocidad minima de fluidizacion
Ar=((dp^3)*d_aire*(d_solid-d_aire)*g)/(Vis_aire^2); % Numero de
arquimedes
K1=1.75/((Emf^3)*Esf);
K2=(150*(1-Emf))/((Emf^3)*(Esf^2));
pol3=[K1 K2 -Ar];
Remf=roots(pol3);

if Remf(2,1) > 0;
    Remf=Remf(2,1);
elseif Re(1,1) > 0;
    Remf=Remf(1,1);
end

umf = (Remf*Vis_aire)/(dp*d_aire); % Velocidad de minima fluidizacion
(m/s)

% Parametros geometricos del reactor
D=4; %Diámetro interno del reactor (m)
A=(pi*(D^2))/4; % Área interna del reactor (m2)
u0=vo_vmf*umf % Velocidad superficial del gas (m/s)
Qcomb=u0*A; %Caudal (m3/s)

% Biomasa inyectada a la entrada
xc=0.52; xh=0.06; xo=0.42;
bi=100; % (g/s) caudal de biomasa. suponemos combustion total
mC=xc*bi; % (g/s) de Carbono
mH=xh*bi; % (g/s) de Hidrogeno
mO=xo*bi; % (g/s) de oxigeno

% CxHyOz + K*O2 = x*CO2 + (y/2)*H2O
gco2=((mC*44)/12); % gramos de CO2
gh2o=((mH*18)/2); % gramos de H2O
KO=((gco2-mC)+(gh2o-mH))-mO)/2; % gramos de O2 estequetrico
```

Análisis de la estrategia de modelado de gasificadores de biomasa en lecho fluidizado

```
ST=(KO/0.21)/bi;    % cociente estequetrico para calcular la
biomasa
Qaire=(umf*vo_vmf*A*d_aire); % caudal aire (Kg/s)
Bi=(Qaire)/(ER*ST); % (Kg/s) de Biomasa

%Calculo de Hentalpias de cada reaccion
%Reacciones consideradas
%R1.    H2 + 1/2*O2 = H2O
%R2.    CO + 1/2*O2 = CO2
%R3.    CH4 + 2*O2 = CO2 + 2*H2O
%R4.    C + H2O = CO + H2
%R5.    C + CO2 = CO
%R6.    C + 2*H2 = CH4
%R7.    CO + H2O = H2 + CO2
%R8.    CH4 + H2O = CO + 3*H2

%M-file con los datos termodinámicos
global Href Sref coef_JANAF_LT coef_JANAF_UT nDT

%Orden de la matriz:
%%% Columnas %%%
%1ª columna: a1 (Upper range temperature)
%2ª columna: a2 (Upper range temperature)
%3ª columna: a3 (Upper range temperature)
%4ª columna: a4 (Upper range temperature)
%5ª columna: a5 (Upper range temperature)
%6ª columna: a6 (Upper range temperature)
%7ª columna: a7 (Upper range temperature)
%8ª columna: a1 (Low range temperature)
%9ª columna: a2 (Low range temperature)
%10ª columna: a3 (Low range temperature)
%11ª columna: a4 (Low range temperature)
%12ª columna: a5 (Low range temperature)
%13ª columna: a6 (Low range temperature)
%14ª columna: a7 (Low range temperature)
%%% Filas %%%
%1ª fila: H2
%2ª fila: N2
%3ª fila: O2
%4ª fila: CO
%5ª fila: CO2
%6ª fila: H2O
%7ª fila: CH4
%8ª fila: C

%%%Bibliografía: JANAF Thermodynamic Data
%%% Href & Sref %%%
Href=[0 0 0 -26.42 -105.5 -57.8 -17.9 0]; % (kcal/mol)
Href=4.18*1e3*Href; %J/mol
Sref=[31.21 45.77 49.01 47.21 57.49 45.11 44.49 0]; % (cal/mol)
Sref=4.18*Sref; %J/mol
nDT=size(Href,2); %número de especies

% Rango de temperatura: 300-1000K (Low range temperature)
coef_JANAF_LT=[3.29812400e0 8.24944200e-4 -8.14301500e-7 -
9.47543400e-11 4.13487200e-13 -1.01252100e3 -3.29409400e0; %H2
3.29867700e0 1.4082400e-3 -3.96322200e-6 5.64151500e-9 -
2.444855e-12 -1.02090000e3 3.95037200e0; %N2
```

Análisis de la estrategia de modelado de gasificadores de biomasa en lecho fluidizado

```

3.21293600e0 1.12748600e-3 -5.75615000e-7 1.31387700e-9 -
8.76855400e-13 -1.00524900e3 6.03473800e0; %O2
3.26245200e0 1.511941e-3 -3.88175500e-6 5.58194400e-9 -
2.47495100e-12 -1.43105400e4 4.84889700e0; %CO
2.63707700e0 7.80323000e-3 -8.19618700e-6 6.53789700e-9 -
2.52022000e-12 -5.41677300e4 1.18895500e1; %CO2
3.38684200e0 3.47498200e-3 -6.35469600e-6 6.96858100e-9 -
2.50658800e-12 -3.02081100e4 2.59023300e0; %H2O
7.78741500e0 1.74766800e-2 -2.78340900e-5 3.04970800e-8 -
1.22393100e-11 -9.82522900e3 1.37221900e1; %CH4
-6.70566100e-1 7.18150000e-3 -5.63292100e-6 2.14229900e-9 -
4.16856200e-13 -7.33949800e1 2.60159600e0]; %C(s)

% Rango de temperatura: 1000-4000/5000K, según compuesto (Upper range
temperature)
coef_JANAF_UT=[2.99142300e0 7.00064400e-4 -5.63382900e-8 -
9.23157800e-12 1.58275200e-15 -8.35034000e2 -1.35511000e0; %H2
2.92664000e0 1.48797700e-3 -5.68476100e-7 1.00970400e-10 -
6.75335100e-15 -9.22797700e2 5.98052800e0; %N2
3.69757800e0 6.13519700e-4 -1.25884200e-7 1.77528100e-11 -
1.13643500e-15 -1.23393000e3 3.18916600e0; %O2
3.02507800e0 1.44268900e-3 -5.63082800e-7 1.01858100e-10 -
6.91095200e-15 -1.42683500e4 6.10821800e0; %CO
4.61057400e0 2.53296200e-3 -1.07016500e-6 2.02677100e-10 -
1.42495800e-14 -5.47988200e4 1.44963000e0; %CO2
2.67214600e0 3.05629300e-3 -8.73026000e-7 1.20099600e-10 -
6.39161800e-15 -2.98992100e4 6.86281700e0; %H2O
1.68347900e0 1.02372400e-2 -3.87512900e-6 6.78558500e-10 -
4.50342300e-14 -1.00807900e4 9.62339500e0 ; %CH4
1.49016600e0 1.66212600e-3 -6.68720400e-7 1.29088000e-10 -
9.20533400e-15 -7.07401900e2 -8.71778500e0]; %C(s)

for j=1:nDT;
    a1(j)=coef_JANAF_UT(j,1);
    a2(j)=coef_JANAF_UT(j,2);
    a3(j)=coef_JANAF_UT(j,3);
    a4(j)=coef_JANAF_UT(j,4);
    a5(j)=coef_JANAF_UT(j,5);
    a6(j)=coef_JANAF_UT(j,6);

    cpi(j,1)=Rg*(a1(j)+a2(j)*T(1)+a3(j)*T(1)^2+a4(j)*T(1)^3+a5(j)*T(1)^4)
; %cálculo del calor específico, J/(mol*K)

    H(j)=Rg*T(1)*(a1(j)+a2(j)*0.5*T(1)+a3(j)*(1/3)*T(1)^2+a4(j)*(1/4)*T(1)
)^3+a5(j)*(1/5)*T(1)^4+a6(j)/T(1)); %cálculo de la entalpía, J/mol

    HO(j)=Rg*Tref*(a1(j)+a2(j)*0.5*Tref+a3(j)*(1/3)*Tref^2+a4(j)*(1/4)*Tr
ef^3+a5(j)*(1/5)*Tref^4+a6(j)/Tref);

    S(j)=Rg*(a1(j)*log(T(1))+a2(j)*T(1)+a3(j)*(1/2)*T(1)^2+a4(j)*(1/3)*T(
1)^3+a5(j)*(1/4)*T(1)^4+a6(j)); %J/mol

    SO(j)=Rg*(a1(j)*log(Tref)+a2(j)*Tref+a3(j)*(1/2)*Tref^2+a4(j)*(1/3)*T
ref^3+a5(j)*(1/4)*Tref^4+a6(j));

end;

```


Análisis de la estrategia de modelado de gasificadores de biomasa en lecho fluidizado

```

clear j

H1=((H-HO)')+Href';
S1=((S-SO)')+Sref';

% Matriz de Coeficientes de la reaccion
CO=[-1 0 -1/2 0 0 1 0 0; 0 0 -1/2 -1 1 0 0 0; 0 0 -2 0 1 1 -1 0; 1 0
0 1 0 -1 0 -1; 0 0 0 2 -1 0 0 -1; -2 0 0 0 0 0 1 -1; 1 0 0 -1 1 -1 0
0; 3 0 0 1 0 -1 -1 0];

% Variacion de entalpias y entropias de cada reaccion
AH=CO*H1; % entalpias
AS=CO*S1; % entropias

%Coeficiente libre de Gibbs
AGR=AH-(T*AS); %Coeficiente AGr
keq=exp((-AGR)/(T*Rg));

%Composición de la materia volátil
Xmv=0.45
Xh2 = 0.157-(0.868*Xmv)+(1.388*(Xmv^2)); % Fraccion masica de H2
(Kg H2 / Kg Biomasa)
Xch4 = 0.201-(0.469*Xmv)+(0.241*(Xmv^2)); % Fraccion masica de CH4
(Kg CH4 / Kg Biomasa)
Xco = 0.428-(2.653*Xmv)+(4.845*(Xmv^2)); % Fraccion masica de CO (Kg
CO / Kg Biomasa)
Xco2 = 0.135-(0.90*Xmv)+(1.906*(Xmv^2)); % Fraccion masica de CO2 (Kg
CO2 / Kg Biomasa)
Xh2o =0.409-(2.389*Xmv)+(4.554*(Xmv^2)); % Fraccion masica de H2O
(Kg H2O / Kg Biomasa)

%Fracciones molares iniciales a la entrada del reactor
O2out=0.21*((Qaire*(1000))/28.84); % Moles de O2 de entrada
(moles/seg)
N2out=0.79*((Qaire*(1000))/28.84); % Moles de N2 de entrada
(moles/seg)
H2out=(Xh2*Bi*1000)/2; %Moles H2 entrada (moles/seg)
COout=(Xco*Bi*1000)/28; % Moles de CO entrada (moles/seg)
CO2out=(Xco2*Bi*1000)/44; % Moles de CO2 entrada (moles/seg)
H2Oout=(Xh2o*Bi*1000)/18; %Moles de H2O entrada (moles/seg)
CH4out=(Xch4*Bi*1000)/16; %Moles de CH4 entrada (moles/seg)
Cout=((1-Xmv)*Bi*1000)/12 ; % Moles carbono de entrada (moles/seg)
C1=Cout
fin=[H2out; N2out; O2out; COout; CO2out; H2Oout; CH4out];

% Calculo de velocidades de reaccion al inicio
COin=COout; O2in=O2out; CO2in=CO2out; H2in=H2out; H2Oin=H2Oout;
CH4in=CH4out; N2in=N2out; Cin=Cout;
cCO=COin/Qcomb; cH2O=H2Oin/Qcomb; cH2=H2in/Qcomb; cCO2=CO2in/Qcomb;
cCH4=CH4in/Qcomb; cO2=O2in/Qcomb; % concentraciones

%R1. H2 + 1/2*O2 = H2O
%R2. CO + 1/2*O2 = CO2
%R3. CH4 + 2*O2 = CO2 + 2*H2O
%R4. C + H2O = CO + H2
%R5. C + CO2 = CO
%R6. C + 2*H2 = CH4
%R7. CO + H2O = H2 + CO2

```

Análisis de la estrategia de modelado de gasificadores de biomasa en lecho fluidizado

```
%R8.    CH4 + H2O = CO + 3*H

%modelo 1
k5=1.08*(10^10)*(exp((-125525)/(Rg*T)));
k6=1.78*(10^10)*(exp((-180032)/(Rg*T)));
k7=2.778*(exp((-12560)/(Rg*T)));
k8=4.916*(10^10)*(T^2)*(exp(-36150/(Rg*T)));
k7eq=0.022*(exp((3.473*(10^4))/(Rg*T)));
k8eq=3.106*(10^14)*(exp((-2.088*(10^5))/(Rg*T)));
f5=1;
f6=1;
f7=1;
f8=1;
cs=1;
r(5,1)=k5*cO2*cH2*f5;    % Velocidad de reaccion R1.
r(6,1)=k6*cCO*(cH2O^0.5)*(cO2^0.25)*f6;    % Velocidad de reaccion R2
r(7,1)=k7*((cCO*cH2O)-((cCO2*cH2)/(k7eq)))*f7 ;    % Velocidad de
reaccion R7
r(8,1)=1;

% modelo 2
kbq=0.0265*exp(3968/T);
r(10,1)=3.3*(10^10)*(exp((-2.4*(10^5))/(Rg*T)))*(cCH4^1.7)*(cH2^-
0.8);    % Velocidad de reaccion R8
r(11,1)=1.58*(10^19)*(exp(-24343/T))*(cCH4^0.7)*(cO2^0.8);    %
Velocidad de reaccion R3
r(12,1)=3.98*(10^20)*(exp(-20129/T))*(cCO)*(cO2^0.25)*(cH2O^0.5);    %
Velocidad de reaccion R2
r(13,1)=2.78*(10^6)*(exp(-1510/T))*((cCO*cH2O)-((cCO2*cH2)/kbq));    %
Velocidad de reaccion R7
r(14,1)=2.196*(10^18)*(exp(-13127/T))*(cO2*cH2);    % Velocidad de
reaccion R1

% modelo 3
kj=2.978*(10^-10)*(exp(-44388/T));
kje=keq(7,1);
KCO=2.4602*(10^-12)*(exp((-21137/T)+24.74414))*(T^3);
k3=KCO/0.35;
k4=KCO
r(1,1)=(kj*cH2O*cCO)-((kj/kje)*cCO2*cH2);    % Velocidad de reaccion
R7
r(3,1)=k3*(cH2^2)*cCO2;    % Velocidad de reaccion R1
r(4,1)=k4*cCO2*(cCO^2);    % Velocidad de reaccion R2
r(2,1)=0;
r(9,1)=0;

% Pesos moleculares de los elementos (g/mol)
PM=[2 28 32 28 44 18 16 12];

% Parametro iniciales a la iteraciones
Fout=[H2out; N2out; O2out; COout; CO2out; H2Oout; CH4out; Cout];
Fe=(Fout').*(PM)
Tol=0.1;
Err=[4; 4; 4; 4; 4; 4; 4; 4];
contador=1;
```

Análisis de la estrategia de modelado de gasificadores de biomasa en lecho fluidizado

```
%Metodo de relajacion. Orden de Reacciones consideradas
%3.  CH4 + 2*O2 = CO2 + 2*H2O
%2.  CO + 1/2*O2 = CO2
%1.  H2 + 1/2*O2 = H2O
%8.  CH4 + H2O = CO + 3*H2
%4.  C + H2O = CO + H2
%7.  CO + H2O = H2 + CO2
%6.  C + 2*H2 = CH4
%5.  C + CO2 = CO

while Err(1,1) > Tol | Err(2,1) > Tol | Err(3,1) > Tol | Err(4,1) >
Tol | Err(5,1) > Tol | Err(6,1) > Tol | Err(7,1) > Tol | Err(8,1) >
Tol

    clear x
    clear pol1
    clear pol2
    Fin=Fout;

    %Reaccion CH4 + 2*O2 = CO2 + 2*H2O
    COin=COout; O2in=O2out; CO2in=CO2out; H2in=H2out; H2Oin=H2Oout;
    CH4in=CH4out; N2in=N2out; Cin=Cout;

    if 0.5*CH4in > O2in;
        CO2out=CO2in+0.5*O2in;
        H2Oout=H2Oin+O2in;
        CH4out=CH4in-0.5*O2in;
        O2out=O2in-O2in;

        if CH4out < 0
            CH4out = 0
        end

    elseif 0.5*CH4in < O2in
        CO2out=CO2in+CH4in;
        H2Oout=H2Oin+2*CH4in;
        CH4out=CH4in-CH4in;
        O2out=O2in-2*CH4in;

        if O2out < 0
            O2out = 0
        end

    else
        CO2out=CO2in+CH4in;
        H2Oout=H2Oin+2*CH4in;
        CH4out=CH4in-CH4in;
        O2out=O2in-O2in;
    end

    end

    %Reaccion: CO + 1/2*O2 = CO2
    COin=COout; O2in=O2out; CO2in=CO2out; H2in=H2out; H2Oin=H2Oout;
    CH4in=CH4out; N2in=N2out; Cin=Cout;

    if COin > 2*O2in;
        CO2out=CO2in+2*O2in;
        O2out=O2in-O2in;
```

Análisis de la estrategia de modelado de gasificadores de biomasa en lecho fluidizado

```
COout=COin-2*O2in;

    if COout < 0
        COout = 0
    end

elseif COin < 2*O2in;
    CO2out=CO2in+COin;
    O2out=O2in-(0.5*COin);
    COout=COin-COin;

        if O2out < 0
            O2out = 0
        end

else
    CO2out=CO2in+COin;
    O2out=O2in-O2in;
    COout=COin-COin;
end

%Reaccion:  $H_2 + 1/2*O_2 = H_2O$ 
    COin=COout; O2in=O2out; CO2in=CO2out; H2in=H2out; H2Oin=H2Oout;
CH4in=CH4out; N2in=N2out; Cin=Cout;

if H2in > 2*O2in
    H2Oout=H2Oin+2*O2in;
    O2out=O2in-O2in;
    H2out=H2in-2*O2in;

    if H2out < 0
        H2out = 0
    end

elseif H2in < 2*O2in
    H2Oout=H2Oin+H2in;
    O2out=O2in-(0.5*H2in);
    H2out=H2in-H2in;

    if O2out < 0
        O2out = 0
    end

else
    H2Oout=H2Oin+H2in;
    O2out=O2in-O2in;
    H2out=H2in-H2in;
end

%Reaccion:  $CH_4 + H_2O = CO + 3*H_2$ 
    COin=COout; O2in=O2out; CO2in=CO2out; H2in=H2out; H2Oin=H2Oout;
CH4in=CH4out; N2in=N2out;

    co=COin/Qcomb; h2o=H2Oin/Qcomb; h2=H2in/Qcomb; co2=CO2in/Qcomb;
ch4=CH4in/Qcomb; o2=O2in/Qcomb; n2=N2in/Qcomb % concentraciones

if keq(8,1)*ch4*h2o > co*(h2^3)
    CH4=CH4in/H2Oin; H2O=H2Oin/H2Oin; CO=COin/H2Oin; H2=H2in/H2Oin;
```

Análisis de la estrategia de modelado de gasificadores de biomasa en lecho fluidizado

```

    pol2=[-27 (-27*CO)-(27*H2) keq(8,1)-27*CO*H2-(6*(H2^2)) -
3*(H2^2)-keq(8,1)-(keq(8,1)*CH4)-(9*CO*(H2^2))-(H2^3) keq(8,1)*H2]
    x=roots(pol2)
    if imag(x(4,1))==0 & real(x(4,1)) > 0 & real(x(4,1)) < 1;
        x = real(x(4,1))
    elseif imag(x(3,1))==0 & real(x(3,1)) > 0 & real(x(3,1)) < 1;
        x = real(x(3,1))
    else
        if imag(x(2,1))==0 & real(x(2,1)) > 0 & real(x(2,1))
< 1;
            x = real(x(2,1))
        elseif imag(x(1,1))==0 & real(x(1,1)) > 0 &
real(x(1,1)) < 1;
            x = real(x(1,1))
        else
            x=0
        end

    end
    CH4out=CH4in-x*H2Oin;
    H2Oout=H2Oin-x*H2Oin;
    COout=(COin)+(x*H2Oin);
    H2out=H2in+3*x*H2Oin;

    if CH4out < 0;
        CH4out = 0;
    end

elseif keq(8,1)*ch4*h2o < co*(h2^3)
    CH4=CH4in/COin; H2O=H2Oin/COin; CO=COin/COin; H2=H2in/COin;
    pol2=[27 (-27-(27*H2)) (27*H2)+(9*(H2^2))-keq(8,1) -9*(H2^2)-(
(H2^3)-(CH4*keq(8,1))-(H2O*keq(8,1)) (H2^3)-(CH4*H2O*keq(8,1)) ]
    x=roots(pol2)
    if imag(x(4,1))==0 & real(x(4,1)) > 0 & real(x(4,1)) < 1;
        x = real(x(4,1))
    elseif imag(x(3,1))==0 & real(x(3,1)) > 0 & real(x(3,1)) < 1;
        x = real(x(3,1))
    else
        if imag(x(2,1))==0 & real(x(2,1)) > 0 & real(x(2,1))
< 1;
            x = real(x(2,1))
        elseif imag(x(1,1))==0 & real(x(1,1)) > 0 &
real(x(1,1)) < 1;
            x = real(x(1,1))
        else
            x=0
        end

    end
    CH4out=CH4in+x*COin;
    H2Oout=H2Oin+x*COin;
    COout=COin-x*COin;
    H2out=H2in-3*x*COin;

    if H2out < 0;
        H2out = 0;
    end
end

```

```

else
    H2out=H2in;
    CH4out=CH4in;
    COout=COin;
    H2Oout=H2Oin;
end

% Reacciones gas solido

%Reacion:   C + H2O = CO + H2
COin=COout; O2in=O2out; CO2in=CO2out; H2in=H2out; H2Oin=H2Oout;
CH4in=CH4out; N2in=N2out; Cin=Cout;

co=COin/Qcomb; h2o=H2Oin/Qcomb; h2=H2in/Qcomb; co2=CO2in/Qcomb;
ch4=CH4in/Qcomb; o2=O2in/Qcomb; n2=N2in/Qcomb; c=Cin/Qcomb; %
concentraciones

if keq(4,1)*h2o > co*h2;
    C=Cin/H2Oin; H2O=H2Oin/H2Oin; CO=COin/H2Oin; H2=H2in/H2Oin;
    pol4=[1 (CO+H2+keq(4,1)) (CO*H2)-keq(4,1)]
    x=roots(pol4)
    if x(2,1) >= 0 & x(2,1) <= 1;
        x = x(2,1)
    elseif x(1,1) >= 0 & x(1,1) <= 1;
        x = x(1,1)
    else
        x=0
    end
    H2out=H2in+(H2Oin*x);
    COout=COin+(H2Oin*x);
    Cout=Cin-(H2Oin*x);
    H2Oout=H2Oin-(H2Oin*x);

    if Cout < 0;
        Cout = 0;
    end;

elseif keq(4,1)*h2o < co*h2;
    C=Cin/COin; H2O=H2Oin/COin; CO=COin/COin; H2=H2in/COin;
    pol4=[-1 (keq(4,1)+1+H2) (keq(4,1)*H2O)-H2]
    x=roots(pol4)
    if x(2,1) >= 0 & x(2,1) <= 1;
        x = x(2,1)
    elseif x(1,1) >= 0 & x(1,1) <= 1;
        x = x(1,1)
    else
        x=0
    end
    H2out=H2in+(COin*x);
    COout=COin+(COin*x);
    Cout=Cin-(COin*x);
    H2Oout=H2Oin-(COin*x);

    if Cout < 0;
        Cout = 0;
    end
end

```

Análisis de la estrategia de modelado de gasificadores de biomasa en lecho fluidizado

```

        if H2Oout < 0
            H2Oout = 0
        end

    else
        H2out=H2in;
        COout=COin;
        Cout=Cin;
        H2Oout=H2Oin;
    end

%Reaccion: CO + H2O = H2 + CO2
    H2in=H2out; N2in=N2out; O2in=O2out; COin=COout; CO2in=CO2out;
    H2Oin=H2Oout; CH4in=CH4out; Cin=Cout;

    co=COin/Qcomb; h2o=H2Oin/Qcomb; h2=H2in/Qcomb; co2=CO2in/Qcomb;
    ch4=CH4in/Qcomb; o2=O2in/Qcomb; n2=N2in/Qcomb; % concentraciones

    if keq(7,1)*co*h2o > h2*co2
        CO=COin/COin; H2O=H2Oin/COin; H2=H2in/COin; CO2=CO2in/COin;
        poll=[1-keq(7,1) H2+CO2+(H2O*keq(7,1))+keq(7,1) (H2*CO2)-
        (H2O*keq(7,1))]
        x=roots(poll)
        if x(2,1) >= 0 & x(2,1) <= 1;
            x = x(2,1)
        elseif x(1,1) >= 0 & x(1,1) <= 1;
            x = x(1,1)
        else x(1,1) < 0 | x(1,1) > 1 | x(2,1) > 1 | x(2,1) < 1;
            x=0
        end
        COout=COin-x*COin;
        H2Oout=H2Oin-x*COin;
        H2out=H2in+x*COin;
        CO2out=CO2in+x*COin;

        if H2Oout < 0;
            H2Oout = 0;
        end

    elseif keq(7,1)*co*h2o < h2*co2;
        CO=COin/H2in; H2O=H2Oin/H2in; H2=H2in/H2in; CO2=CO2in/H2in;
        poll=[keq(7,1)-1 1+CO2+(keq(7,1)*(CO+H2O)) (keq(7,1)*CO*H2O)-CO2]
        x=roots(poll)
        if x(2,1) >= 0 & x(2,1) <= 1;
            x = x(2,1)
        elseif x(1,1) >= 0 & x(1,1) <= 1;
            x = x(1,1)
        else x(1,1) < 0 | x(1,1) > 1 | x(2,1) > 1 | x(2,1) < 1;
            x=0
        end
        COout=COin+x*H2in;
        H2Oout=H2Oin+x*H2in;
        H2out=H2in-x*H2in;
        CO2out=CO2in-x*H2in;

        if CO2out < 0
            CO2out = 0
        end
    end

```

Análisis de la estrategia de modelado de gasificadores de biomasa en lecho fluidizado

```
else
    H2out=H2in;
    CO2out=CO2in;
    COout=COin;
    H2Oout=H2Oin;
end

%Reacion:   C + CO2 = 2*CO
COin=COout; O2in=O2out; CO2in=CO2out; H2in=H2out; H2Oin=H2Oout;
CH4in=CH4out; N2in=N2out; Cin=Cout;

co=COin/Qcomb; h2o=H2Oin/Qcomb; h2=H2in/Qcomb; co2=CO2in/Qcomb;
ch4=CH4in/Qcomb; o2=O2in/Qcomb; n2=N2in/Qcomb; c=Cin/Qcomb;

if keq(5,1)*co2 > co^2;
    CO=COin/CO2in; CO2=CO2in/CO2in; C=Cin/CO2in;
    pol5=[4 (4*CO)+keq(5,1) (CO^2)-keq(5,1)]
    x=roots(pol5)
    if x(2,1) >= 0 & x(2,1) <= 1;
        x = x(2,1)
    elseif x(1,1) >= 0 & x(1,1) <= 1;
        x = x(1,1)
    else
        x=0
    end
    COout=COin+(2*x*CO2in);
    CO2out=CO2in-(x*CO2in);
    Cout=Cin-(x*CO2in);

    if Cout < 0;
        Cout = 0;
    end

elseif keq(5,1)*co2 < co^2;
    CO=COin/COin; CO2=CO2in/COin; C=Cin/COin;
    pol5=[keq(5,1) -2*keq(5,1)-0.5 keq(5,1)-CO2]
    x=roots(pol5)
    if x(2,1) >= 0 & x(2,1) <= 1;
        x = x(2,1)
    elseif x(1,1) >= 0 & x(1,1) <= 1;
        x = x(1,1)
    else
        x=0
    end

    COout=COin-(x*COin);
    CO2out=CO2in+(x*0.5*COin);
    Cout=Cin+(x*0.5*COin);

    if COout < 0;
        COout = 0;
    end

else
    COout=COin;
    CO2out=CO2in;
```


Análisis de la estrategia de modelado de gasificadores de biomasa en lecho fluidizado

```
Cout=Cin;
end

%Reacion:  C + 2*H2 = CH4
COin=COout; O2in=O2out; CO2in=CO2out; H2in=H2out; H2Oin=H2Oout;
CH4in=CH4out; N2in=N2out; Cin=Cout;

co=COin/Qcomb; h2o=H2Oin/Qcomb; h2=H2in/Qcomb; co2=CO2in/Qcomb;
ch4=CH4in/Qcomb; o2=O2in/Qcomb; n2=N2in/Qcomb; c=Cin/Qcomb;

if keq(6,1)*((h2)^2) > ch4;
    C=Cin/H2in; H2=H2in/H2in; CH4=CH4in/H2in;
    pol6=[keq(6,1) (-2*keq(6,1))-0.5 keq(6,1)*CH4]
    x=roots(pol6)
    if x(2,1) >= 0 & x(2,1) <= 1;
        x = x(2,1)
    elseif x(1,1) >= 0 & x(1,1) <= 1;
        x = x(1,1)
    else
        x=0
    end

    CH4out=CH4in+(x*H2in);
    Cout=Cin-(x*H2in);
    H2out=H2in-(2*x*H2in);

    if Cout < 0;
        Cout = 0;
    end

    if H2out < 0
        H2out = 0
    end

elseif keq(6,1)*((h2)^2) < ch4;
    C=Cin/CH4in; H2=H2in/CH4in; CH4=CH4in/CH4in;
    pol6=[4*keq(6,1) (4*keq(6,1)*H2)+1 (keq(6,1)*(H2^2))-1]
    x=roots(pol6)
    if x(2,1) >= 0 & x(2,1) <= 1;
        x = x(2,1)
    elseif x(1,1) >= 0 & x(1,1) <= 1;
        x = x(1,1)
    else
        x=0
    end

    CH4out=CH4in-(x*CH4in);
    Cout=Cin+(x*CH4in);
    H2out=H2in+(2*x*CH4in);

else
    CH4out=CH4in;
    Cout=Cin;
    H2out=H2in;
end
```

Análisis de la estrategia de modelado de gasificadores de biomasa en lecho fluidizado

```
Fout=[H2out; N2out; O2out; COout; CO2out; H2Oout; CH4out; Cout];
contador=contador+1

    if contador < 50;
        Err=Fout-Fin;
    elseif contador == 50;
        Err=[0.01; 0.01; 0.01; 0.01; 0.01; 0.01; 0.01; 0.01];
    end

end

% Balance de materia entrada salida (g)
Foutkg=(Fout').*PM; % Masas de cada especie salida (g)
MS=sum(Foutkg); % Masa total de salida (g)
ME=sum(Fe); %Masa total de entrada (g)
VM=ME-MS;

fout=[Fout(1,1); Fout(2,1); Fout(3,1); Fout(4,1); Fout(5,1);
Fout(6,1); Fout(7,1)];

for z=1:7;
    f(z,1)=(fout(z,1)/(sum(fout)))*100;
    Conv(z,1)=fout(z,1)-fin(z,1);
end

% Parametros de salida
sum(f);
C2=Fout(8,1);
Cpor=((C1-C2)/C1)*100;
f(8,1)=Cpor;
PC=[ 9.9 11.6 32.8] ; % (MJ/Nm3)
f(9,1)=(9.9*(f(1,1)/100))+(11.6*(f(4,1)/100))+(32.8*(f(7,1)/100)); %
Heating Value
f
```

Análisis de la estrategia de modelado de gasificadores de biomasa en lecho fluidizado

```
% MODELO DE SIMULACIÓN EN MATLAB. MODELO CINETICO

% Datos de entrada
T=1073; %Temperatura de reacción (K)
ER=0.25; % Equivalence Ratio
x=1.2; % Estado de fluidización
D=4; % Diámetro interno del reactor (m)
A=pi*(D^2)/4; % Área interna del reactor (m2)
H_D=1.5; % Relacion H/D
H=H_D*D; % Altura del lecho
nd=3000; % Número de orificios del reactor
P=101325; %Presión atmosférica (Pa)
g=9.81; %Aceleración de la gravedad (m2/s)
Rg=8.314; %Constante cinética de los gases (J/mol*K)
z0=0;
z=z0;
zf=H;
num_pisos=20000;
paso=H/num_pisos; %paso (m)
conv_char_sup=0.5/num_pisos; % Conversión de carbón por piso,
Suposición inicial
dp=1.25E-3; % Diámetro de las partículas (m)
d_solid=2650; % Densidad del solido (kg/m3)
Esf=0.67; % Esfericidad
Emf=0.4; % Porosidad
w=0; % Humedad relativa de la biomasa
ash=0.0467; %Proporción de cenizas
as=6/dp; % área específica de las partículas [1/m]
DG=8.677E-5*((T^1.75)/P); % Difusividad del aire [m2/s]
d_aire=1.2101; % densidad del aire [kg/m3]
Vis_aire=1.81E-5; % Viscosidad dinámica del aire[kg/(m*s)]

%Composición de la materia volátil
Xmv=0.45; % Fracción másica de materia volátil: 0.05-0.51
Xmv_H2=0.157-0.868*Xmv+1.388*Xmv^2; % H2
Xmv_CO=0.428-2.653*Xmv+4.845*Xmv^2; % CO
Xmv_CO2=0.135-0.9*Xmv+1.906*Xmv^2; %CO2
Xmv_H2O=0.409-2.389*Xmv+4.554*Xmv^2; % H2O
Xmv_CH4=0.201-0.469*Xmv+0.241*Xmv^2; % CH4
Xtar=1-Xmv_CO-Xmv_H2-Xmv_CO2-Xmv_CH4-Xmv_H2O; % tar
Xmv_gas=[Xmv_CO Xmv_H2 Xmv_CO2 Xmv_CH4 0 0 Xmv_H2O];

%Pesos moleculares
PM_gases=[28 2 44 16 0 0 18]*1E-3; % Peso molecular de los gases
(kg/mol)
PM_C=12E-3; %Peso molecular Carbón (kg/mol)
PM_H=1E-3; % Peso molecular Hidrógeno (kg/mol)
PM_O=16E-3; % Peso molecular Oxígeno (kg/mol)
PM_N=14E-3; % Peso molecular Nitrógeno (kg/mol)
rel_aire_O2=0.21; %Fracción de oxígeno en el aire
rel_O2_vapor=0; %Relacion de oxigeno vapor (H2O vapor)

% Biomasa inyectada a la entrada
f_C=6; % (mol/s)
f_OB=3.6; % (mol/s)
f_OH=8.4; % (mol/s)
d_char=836; % [kg/m3]
f_CO2=f_C; % (mol/s)
```

Análisis de la estrategia de modelado de gasificadores de biomasa en lecho fluidizado

```

f_H2O=f_OH/2;    %(mol/s)
f_O2=(f_C*2+f_H2O-f_OB)/2;    %(mol/s)
f_aire_est=f_O2/rel_aire_O2;    %(mol/s)
PM_aire=28.96E-3;    %Peso molecular aire(kg/mol)
PM_biomasa=f_C*PM_C+f_OB*PM_O+f_OH*PM_H; %Peso molecular
biomasa(kg/mol)
m_aire_est=f_aire_est*PM_aire;    %(kg/s)
m_O2_est=m_aire_est*PM_O*2/PM_aire*rel_aire_O2;    %(kg/s)
m_N2_est=m_aire_est*PM_N*2/PM_aire*(1-rel_aire_O2);    %(kg/s)
Qcomb=m_aire_est/d_aire;    %(m3/s)
Amf=1.75/(Esf*(Emf^3))*(d_aire*dp/Vis_aire)^2;
Bmf=150*(1-Emf)/((Emf^3)*Esf^2)*(d_aire*dp/Vis_aire);
Cmf=-(dp^3)*d_aire*(d_solid-d_aire)*g/Vis_aire^2;
umf=(-Bmf+sqrt(Bmf^2-4*Amf*Cmf))/(2*Amf); %Velocidad mínima de
fluidización (m/s)
Qmf=umf*A; %(m3/s)
Q_aire_real=x*Qmf;
f_aire_real=Q_aire_real*d_aire/PM_aire; %(mol/s)
m_aire_real=f_aire_real*PM_aire; %(kg/s)
m_O2=m_aire_real*PM_O*2/PM_aire*rel_aire_O2; %(kg/s)
m_N2=m_aire_real*PM_N*2/PM_aire*(1-rel_aire_O2); %(kg/s)
m_vapor=rel_O2_vapor*m_O2; %masa de vapor a la entrada (kg/s)
f_solid_est=1; %(mol/s)
f_biomasa=(1/ER)*(f_aire_real)/(f_aire_est/f_solid_est); % (mol/s)
m_biomasa=f_biomasa*PM_biomasa; %(kg/s) biomasa a la entrada,
m_biomasa_seca=m_biomasa*(1-w)*(1-ash); %(kg/s) biomasa sin humedad
ni cenizas
m_H2O_humedad_biomasa=m_biomasa*w;
m_char=m_biomasa_seca*(1-Xmv); % Char de entrada (kg/s)
m_dev_gases_total=m_biomasa_seca*Xmv; % Volátiles totales a la
entrada
m_dev_gases=m_dev_gases_total*Xmv_gas; % Volátiles a la entrada por
compuesto (kg/s)
f_char0=m_char/PM_C;
f_dev_gases=m_dev_gases./PM_gases; %En O2 y N2 divide por cero
f_dev_gases(5)=0;
f_dev_gases(6)=0;

%Hidrodinámica del lecho fluidizado
u0=x*umf; % Velocidad superficial del gas (m/s)
db0=(0.347*(A*(100^2)*(u0-umf)*100/nd)^0.4)/100; % Diámetro de
burbuja inicial (m)
dbm=(0.652*(A*(100^2)*(u0-umf)*100)^0.4)/100; % Diámetro medio de
burbuja (m)
B=1+10.978*((u0-
umf)^0.738)*(d_solid^0.376)*(dp^1.006)/(((umf)^0.937)*(d_aire^0.126)
); %Babu
Eb=1-1/B; %Fracción de volumen de las burbujas
Ef=Eb+(1-Eb)*Emf; %(fracción de vacío del lecho)
E_s=1-Ef; %Fracción de volumen ocupado por el solido
db=dbm-(dbm-db0)*exp(-0.3*z/D); %Diametro efectivo de burbuja (m)
ubr=0.711*(g*db)^0.5; % Velocidad de burbuja(m/s)
ub=u0-umf+ubr; %Incremento velocidad de burbuja [m/s]

```

Análisis de la estrategia de modelado de gasificadores de biomasa en lecho fluidizado

```
%Concentraciones iniciales [CO H2 CO2 CH4 O2 N2 H2O]

cReac=[0 0 0 0 m_O2/(PM_O*2) m_N2/(PM_N*2)
(m_vapor+m_H2O_humedad_biomasa)/PM_gases(7)]/(A*u0);
cDevol=f_dev_gases/(A*u0);
c0=cReac+cDevol; %(mol/m3)
cB=c0;
cE=c0;
cBtot=cB(1)+cB(2)+cB(3)+cB(4)+cB(5)+cB(6)+cB(7);
cEtot=cE(1)+cE(2)+cE(3)+cE(4)+cE(5)+cE(6)+cE(7);

% Caudales molares
fCO_Bin=cB(1)*A*ub*Eb; % fase bubble
fH2_Bin=cB(2)*A*ub*Eb;
fCO2_Bin=cB(3)*A*ub*Eb;
fCH4_Bin=cB(4)*A*ub*Eb;
fO2_Bin=cB(5)*A*ub*Eb;
fN2_Bin=cB(6)*A*ub*Eb;
fH2O_Bin=cB(7)*A*ub*Eb;
fTOT_Bin=fCO_Bin+fH2_Bin+fCO2_Bin+fCH4_Bin+fO2_Bin+fN2_Bin+fH2O_Bin;
fCO_Ein=cE(1)*A*umf*(1-Eb); % fase emulsion
fH2_Ein=cE(2)*A*umf*(1-Eb);
fCO2_Ein=cE(3)*A*umf*(1-Eb);
fCH4_Ein=cE(4)*A*umf*(1-Eb);
fO2_Ein=cE(5)*A*umf*(1-Eb);
fN2_Ein=cE(6)*A*umf*(1-Eb);
fH2O_Ein=cE(7)*A*umf*(1-Eb);
fTOT_Ein=fCO_Ein+fH2_Ein+fCO2_Ein+fCH4_Ein+fO2_Ein+fN2_Ein+fH2O_Ein;

%Fracciones molares iniciales a la entrada del reactor
xCO_Bin=cB(1)/cBtot; % fase bubble
xH2_Bin=cB(2)/cBtot;
xCO2_Bin=cB(3)/cBtot;
xCH4_Bin=cB(4)/cBtot;
xO2_Bin=cB(5)/cBtot;
xN2_Bin=cB(6)/cBtot;
xH2O_Bin=cB(7)/cBtot;
xTOT_Bin=xCO_Bin+xH2_Bin+xCO2_Bin+xCH4_Bin+xO2_Bin+xN2_Bin+xH2O_Bin;
xCO_Ein=cE(1)/cEtot; %Fase emulsion
xH2_Ein=cE(2)/cEtot;
xCO2_Ein=cE(3)/cEtot;
xCH4_Ein=cE(4)/cEtot;
xO2_Ein=cE(5)/cEtot;
xN2_Ein=cE(6)/cEtot;
xH2O_Ein=cE(7)/cEtot;
xTOT_Ein=xCO_Ein+xH2_Ein+xCO2_Ein+xCH4_Ein+xO2_Ein+xN2_Ein+xH2O_Ein;

%Presiones parciales [atm]
P_B=[xCO_Bin xH2_Bin xCO2_Bin xCH4_Bin xO2_Bin xN2_Bin xH2O_Bin
xTOT_Bin]*P*(Eb)/101325;
P_E=[xCO_Ein xH2_Ein xCO2_Ein xCH4_Ein xO2_Ein xN2_Ein xH2O_Ein
xTOT_Ein]*P*(1-Eb)/101325;

%Tabla de constantes de reacción
% [CO, CO2, H2, H2O, CH4, Char]
if T<=1000
%Rango: 300K to 1000K
```

Análisis de la estrategia de modelado de gasificadores de biomasa en lecho fluidizado

```
Ag=[-1.586446E+00 -7.912764E+00 6.592218E+00 7.966100E-01 -  
1.294345E+01 -3.272161E+00];  
Bg=[-7.559705E-04 -4.961036E-03 -4.961036E-03 -1.737491E-03 -  
8.738340E-03 -3.590750E-03];  
Cg=[6.469592E-07 1.734852E-06 1.357169E-07 1.059116E-06 -5.722238E-10  
7.896195E-12];  
Dg=[-4.651620E-10 -5.722238E-10 7.896195E-12 -5.807151E-10 -  
2.541423E-09 -1.785248E-10];  
Eg=[4.124918E-13 3.528800E-13 -6.891453E-14 4.177647E-13 2.039885E-12  
6.947603E-14];  
Fg=[-1.431054E+04 -4.837314E+04 -1.012521E+03 -3.020811E+04 -  
9.825229E+03 -7.339498E+01];  
Gg=[-3.262451E+00 -2.275724E+00 -3.298124E+00 -3.386842E+00 -  
7.787415E-01 6.705661E-01];
```

```
else
```

```
%Rango: 1000K to 5000K
```

```
Ag=[-3.083139E+00 5.409019E+00 4.346533E+00 -4.190672E+00 -  
7.939917E+00 1.020795E+01];  
Bg=[-7.213443E-04 -1.570084E-03 -3.500322E-04 -1.528147E-03 -  
5.118618E-03 -8.310628E-04];  
Cg=[9.384712E-08 2.130684E-07 9.389713E-09 1.455043E-07 6.458547E-07  
1.114534E-07];  
Dg=[-8.488178E-12 -1.994997E-11 7.692982E-13 -1.000830E-11 -  
5.654654E-11 -1.075733E-11];  
Eg=[1.151825E-15 2.781722E-15 -2.637920E-16 1.065270E-15 7.505705E-15  
1.534222E-15];  
Fg=[-1.426835E+04 -4.896696E+04 -8.350340E+02 -2.989921E+04 -  
1.008079E+04 -7.074018E+02];  
Gg=[-3.025078E+00 -4.453623E+00 -2.991423E+00 -2.672145E+00 -  
1.683478E+00 -1.490166E+00];
```

```
end
```

```
%Reacciones:
```

```
%R1. C+H2O=CO+H2;
```

```
%R2. C+2H2=CH4;
```

```
%R3. C+1/2H2O+1/2H2=1/2CO+1/2CH4;
```

```
%R4. H2+1/2O2->H2O;
```

```
%R5. CO+1/2O2->CO2;
```

```
%R6. CH4+2O2->CO2+2H2O;
```

```
%R7. CO+H2O=H2+CO2;
```

```
%R8. C+0.85O2->0.3CO+0.7CO2
```

```
%Energía libre de Gibbs (J/molK)
```

```
go=Rg*T*(Ag+Bg*T+Cg*T^2+Dg*T^3+Eg*T^4+Fg*T^-1+Gg*log(T)); % Función  
de Gibbs (J/mol)
```

```
diff_R1=go(1)+go(3)-go(4)-go(6);
```

```
diff_R2=go(5)-2*go(3)-go(6);
```

```
diff_R3=0.5*go(1)+0.5*go(5)-go(6)-0.5*go(4)-0.5*go(3);
```

```
diff_R4=go(4)-go(3);
```

```
diff_R5=go(2)-go(1);
```

```
diff_R6=go(2)+2*go(4)-go(5);
```

```
diff_R7=go(3)+go(2)-go(1)-go(4);
```

```
% Constantes de equilibrio para las reacciones
```

```
Keq_R1=10^(7.49-7070/T);
```

```
Keq_R2=10^(-5.373+47723/T);
```

Análisis de la estrategia de modelado de gasificadores de biomasa en lecho fluidizado

```

Keq_R3=Keq_R1*Keq_R2;
Keq_R4=exp(-diff_R4/(Rg*T));
Keq_R5=exp(-diff_R5/(Rg*T));
Keq_R6=exp(-diff_R6/(Rg*T));
Keq_R7=exp(-diff_R7/(Rg*T));

% Constante de reacción para R1,R2,R3,R4,R5,R7
Ar=[3.616e1 1.517e4 4.189e-3 7.301e-2];
Er=(1e3)*[77.39 121.62 19.21 36.15];
for j=1:length(Ar)
ki(j)=Ar(j)*exp(-Er(j)/(Rg*T)); % heterogéneas
end
k5_CO=(2.4602E-12)*(exp(-21137/T+24.74414))*T^3; % homogéneas
k4_H2=k5_CO/0.35;
k7forward=7.97e12*exp(-274.1e3/(Rg*T))*0.01^1.5;
k7reverse=2.3e16*(0.1^1.5)*exp(-397.5e3/(Rg*T));
ScO2=Vis_aire/(d_aire*DG);
ReO2=d_aire*umf*dp/Vis_aire;

%Coeficientes estequiométricos
%Reacciones en fase emulsion:
%R1,R2,R3, (heterogéneas)
%R4,R5,R6,R7 (homogéneas)
%Reacciones en fase burbuja:
%R4,R5,R6,R7 (homogéneas)
%COLUMNAS:[CO H2 CO2 CH4 O2 N2 H2O]
%FILAS: %R1. C+H2O=CO+H2;
        %R2. C+2H2=CH4;
        %R3. C+1/2H2O+1/2H2=1/2CO+1/2CH4;
        %R4. H2+1/2O2->H2O;
        %R5. CO+1/2O2->CO2;
        %R6. CH4+2O2->CO2+2H2O;
        %R7. CO+H2O=H2+CO2;
        %R8. C+0.85O2->0.3CO+0.7CO2

alpha1=[1 1 0 0 0 0 -1];
alpha2=[0 -2 0 1 0 0 0];
alpha3=[0.5 -0.5 0 0.5 0 0 -0.5];
alpha4=[0 -1 0 0 -0.5 0 1];
alpha5=[-1 0 1 0 -0.5 0 0];
alpha6=[0 0 1 -1 -2 0 2];
alpha7=[-1 1 1 0 0 0 -1];
f_T=(4.72E-3)*exp(37737/(Rg*T));
alpha_comb=(1+2*f_T)/(1+f_T);
alpha8=[2*(1-1/alpha_comb) 0 (2/alpha_comb-1) 0 -1/alpha_comb 0 0];
alpha_J=52.7*P_E(2)/(1+54.3*P_E(2))+0.521*(P_E(2)^0.5)*P_E(7)/(1+0.70
7*P_E(2)+0.5*(P_E(2)^0.5)*P_E(7));

f_char=f_char0; %Caudal molar inicial de char
Mc=m_char/m_biomasa;
Yc=Mc;
kg=DG/dp*(2*Emf+0.69*ScO2^(1/3)*(ReO2/Eb)^0.5); %ratio de trans masa
entre superficie de particulas

%Balance de masa. Aplicación del RK4 para resolución de sistema de
EDOs.
xx=inline('((ub*Eb)^-1)*(kBE*a_b*(cE-
cB)+net_flow+Eb*(alpha4*r4_H2_B+alpha5*r5_CO_B+alpha6*r6_CH4_B+alpha7

```

Análisis de la estrategia de modelado de gasificadores de biomasa en lecho fluidizado

```

*r7_B))','a_b','z','cB','cE','kBE','A','Eb','ub','alpha4','alpha5','a
lpha6','alpha7','r4_H2_B','r5_CO_B','r6_CH4_B','r7_B','net_flow');%fa
se burbuja
yy=inline('( (umf*(1-Eb))^-1)*(kBE*a_b*(cB-cE)-net_flow+(1-
Eb)*(Emf*(alpha4*r4_H2_E+alpha5*r5_CO_E+alpha6*r6_CH4_E+alpha7*r7_E)+
(1-
Emf)*(alpha8*r8_E+alpha1*r1_E+alpha2*r2_E+alpha3*r3_E)))','a_b','z','
cB','cE','kBE','A','Eb','Emf','umf','alpha1','alpha2','alpha3','alpha
4','alpha5','alpha6','alpha7','alpha8','r4_H2_E','r5_CO_E','r6_CH4_E'
,'r1_E','r2_E','r3_E','r7_E','r8_E','as','net_flow'); %fase emulsion

tol=0.01; % Tolerancia
error=1; % Error inicial
iter=0;

while (abs(error)>=tol)
i=0;
iter=iter+1; %Contador de iteraciones
if iter>1
f_char=f_char0;
z=z0;
cB=c0;
cE=c0;
conv_char_sup=(conv+conv_char_sup)/2;
end

    while(z<zf)
        z=z+paso;
        i=i+1;
        altura(i)=z;
        db=dbm-(dbm-db0)*exp(-0.3*z/D);
        ub=u0-umf+ub0;
        kBE=umf/3+(4*DG*Emf*(ub)/(pi*db))^0.5;
        kBEHongmin(i)=kBE;
        a_b=6*Eb/db; % Area interfacial entre la fase burbuja y emulsion
por unidad de volumen

        % Caudales morales
        cBtot(i)=cB(1)+cB(2)+cB(3)+cB(4)+cB(5)+cB(6)+cB(7);
        cEtot(i)=cE(1)+cE(2)+cE(3)+cE(4)+cE(5)+cE(6)+cE(7);
        fCO_B(i)=cB(1)*A*Eb*ub; % fase burbuja
        fH2_B(i)=cB(2)*A*Eb*ub;
        fCO2_B(i)=cB(3)*A*Eb*ub;
        fCH4_B(i)=cB(4)*A*Eb*ub;
        fO2_B(i)=cB(5)*A*Eb*ub;
        fN2_B(i)=cB(6)*A*Eb*ub;
        fH2O_B(i)=cB(7)*A*Eb*ub;

        fTOT_B(i)=fCO_B(i)+fH2_B(i)+fCO2_B(i)+fCH4_B(i)+fO2_B(i)+fN2_B(i)+fH2
O_B(i);
        fCO_E(i)=cE(1)*A*(1-Eb)*umf; % fase emulsion
        fH2_E(i)=cE(2)*A*(1-Eb)*umf;
        fCO2_E(i)=cE(3)*A*(1-Eb)*umf;
        fCH4_E(i)=cE(4)*A*(1-Eb)*umf;
        fO2_E(i)=cE(5)*A*(1-Eb)*umf;
        fN2_E(i)=cE(6)*A*(1-Eb)*umf;
        fH2O_E(i)=cE(7)*A*(1-Eb)*umf;

```


Análisis de la estrategia de modelado de gasificadores de biomasa en lecho fluidizado

```

fTOT_E(i)=fCO_E(i)+fH2_E(i)+fCO2_E(i)+fCH4_E(i)+fO2_E(i)+fN2_E(i)+fH2
O_E(i);

%Fracciones molares en fase burbuja
xCO_B(i)=cB(1)/cBtot(i); % fase burbuja
xH2_B(i)=cB(2)/cBtot(i);
xCO2_B(i)=cB(3)/cBtot(i);
xCH4_B(i)=cB(4)/cBtot(i);
xO2_B(i)=cB(5)/cBtot(i);
xN2_B(i)=cB(6)/cBtot(i);
xH2O_B(i)=cB(7)/cBtot(i);

xTOT_B(i)=xCO_B(i)+xH2_B(i)+xCO2_B(i)+xCH4_B(i)+xO2_B(i)+xN2_B(i)+xH2
O_B(i);
xCO_E(i)=cE(1)/cEtot(i); % fase emulsion
xH2_E(i)=cE(2)/cEtot(i);
xCO2_E(i)=cE(3)/cEtot(i);
xCH4_E(i)=cE(4)/cEtot(i);
xO2_E(i)=cE(5)/cEtot(i);
xN2_E(i)=cE(6)/cEtot(i);
xH2O_E(i)=cE(7)/cEtot(i);

xTOT_E(i)=xCO_E(i)+xH2_E(i)+xCO2_E(i)+xCH4_E(i)+xO2_E(i)+xN2_E(i)+xH2
O_E(i);

%Cálculo de presiones parciales
P_B(i,:)=[xCO_B(i) xH2_B(i) xCO2_B(i) xCH4_B(i) xO2_B(i)
xN2_B(i) xH2O_B(i) xTOT_B(i)]*P*(Eb)/101325; %Fase Bubble [atm]
P_E(i,:)=[xCO_E(i) xH2_E(i) xCO2_E(i) xCH4_E(i) xO2_E(i) xN2_E(i)
xH2O_E(i) xTOT_E(i)]*P*(1-Eb)/101325; %Fase Emulsion [atm]

% Velocidades de reaccion. Cinética de Johnson
if (f_char>0)

    k1_E=exp(9.0201-17613/T)*(1-
P_E(i,1)*P_E(i,2)/(P_E(i,7)*Keq_R1))/(1+(exp(-
22.216+24881/T))/P_E(i,7)*(1+16.35*P_E(i,2)+43.5*P_E(i,1)))^2;
    k2_E=exp(2.6741-18375/T)*(P_E(i,2)^2-
P_E(i,4)/Keq_R2)/(1+P_E(i,2)*(exp(-10.452+11097/T)));

    if (P_E(i,2)==0)&(P_E(i,4)==0)
        k3_E=0;

    else
        k3_E=(P_E(i,2)^1.5)*exp(12.4663-
24746/T)*(P_E(i,2)*P_E(i,7)-
P_E(i,4)*P_E(i,1)/Keq_R3)/(P_E(i,2)+(exp(-
6.6696+8.443/T))*((P_E(i,2)^1.5)+0.85*P_E(i,1)*P_E(i,2)+18.62*P_E(i,4)
)))^2;

    end

alpha_J=52.7*P_E(i,2)/(1+54.3*P_E(i,2))+0.521*(P_E(i,2)^0.5)*P_E(i,7)
/(1+0.707*P_E(i,2)+0.5*(P_E(i,2)^0.5)*P_E(i,7));
rJ_E=(E_s*d_char*(6.2*Yc*(1-Yc))/PM_C)*((Mc)*((1-
conv_char_sup)^(2/3))*exp(-
alpha_J*(conv_char_sup)^2))*(exp(4704/T)/60)*[k1_E k2_E k3_E];

```

```

r1_E=rJ_E(1); % Velocidad de reaccion R1
r2_E=rJ_E(2); % Velocidad de reaccion R2
r3_E=rJ_E(3); % Velocidad de reaccion R3
r8_E=as*kg*cE(5); %% Velocidad de reaccion R8. Combustión del
char (g/s)
else
    if f_char==0
        r1_E=0;
        r2_E=0;
        r3_E=0;
        r8_E=0;
    end
end

    % Velocidades de reaccion. Cinética de Haslam
    % En fase burbuja
r4_H2_B=k4_H2*((cB(2))^2)*cB(5); % Velocidad de reaccion R4
r5_CO_B=k5_CO*((cB(1))^2)*cB(5); % Velocidad de reaccion R5

if (cB(4)==0) % Velocidad de reaccion R6
r6_CH4_B=0;
else
r6_CH4_B=r5_CO_B;
end

%En fase emulsión
r4_H2_E=k4_H2*((cE(2))^2)*cE(5);
r5_CO_E=k5_CO*((cE(1))^2)*cE(5);

if (cE(4)==0)
r6_CH4_E=0;
else
r6_CH4_E=r5_CO_E;
end

%% Velocidad de reaccion R7
r7_B=k7forward*cB(7)*cB(1)-k7reverse/Keq_R7*cB(3)*cB(2);
r7_E=k7forward*cE(7)*cE(1)-k7reverse/Keq_R7*cE(3)*cE(2);

    %Agotamiento del char
Rt_Char=-r1_E-r2_E-r3_E-r8_E;    %Velocidad de agotamiento de char

f_char=f_char+A*paso*Rt_Char; % Caudal molar de Carbón

if f_char>0
    caud_char(i)=f_char;
else
    f_char=0;
    caud_char(i)=0;
end

%Flujo neto
suma_parcial=0;
cEtotal=0;

for k=1:7

```

Análisis de la estrategia de modelado de gasificadores de biomasa en lecho fluidizado

```

        suma_parcial=suma_parcial+(1-
Eb)*(Emf*(alpha4(k)*r4_H2_E+alpha5(k)*r5_CO_E+alpha6(k)*r6_CH4_E+alph
a7(k)*r7_E)+(1-
Emf)*(alpha8(k)*r8_E+alpha1(k)*r1_E+alpha2(k)*r2_E+alpha3(k)*r3_E));
        cEttotal=cEttotal+cE(k);
    end

    net_flow=cE/cEttotal*suma_parcial;
    fl_net_porpiso(i,:)=net_flow;

    %Evaluacion de las ecuaciones de conservación para los parámetros
    calculados
    %u: fase burbuja
    %v: fase emulsion

    u1=paso*eval('xx(a_b,z,cB,cE,kBE,A,Eb,ub,alpha4,alpha5,alpha6,alpha7,
r4_H2_B,r5_CO_B,r6_CH4_B,r7_B,net_flow)');

    v1=paso*eval('yy(a_b,z,cB,cE,kBE,A,Eb,Emf,umf,alpha1,alpha2,alpha3,al
pha4,alpha5,alpha6,alpha7,alpha8,r4_H2_E,r5_CO_E,r6_CH4_E,r1_E,r2_E,r
3_E,r7_E,r8_E,as,net_flow)');

    u2=paso*eval('xx(a_b,z+paso/2,cB+u1/2,cE+v1/2,kBE,A,Eb,ub,alpha4,alph
a5,alpha6,alpha7,r4_H2_B,r5_CO_B,r6_CH4_B,r7_B,net_flow)');

    v2=paso*eval('yy(a_b,z+paso/2,cB+u1/2,cE+v1/2,kBE,A,Eb,Emf,umf,alpha1
,alpha2,alpha3,alpha4,alpha5,alpha6,alpha7,alpha8,r4_H2_E,r5_CO_E,r6_
CH4_E,r1_E,r2_E,r3_E,r7_E,r8_E,as,net_flow)');

    u3=paso*eval('xx(a_b,z+paso/2,cB+u2/2,cE+v2/2,kBE,A,Eb,ub,alpha4,alph
a5,alpha6,alpha7,r4_H2_B,r5_CO_B,r6_CH4_B,r7_B,net_flow)');

    v3=paso*eval('yy(a_b,z+paso/2,cB+u2/2,cE+v2/2,kBE,A,Eb,Emf,umf,alpha1
,alpha2,alpha3,alpha4,alpha5,alpha6,alpha7,alpha8,r4_H2_E,r5_CO_E,r6_
CH4_E,r1_E,r2_E,r3_E,r7_E,r8_E,as,net_flow)');

    u4=paso*eval('xx(a_b,z+paso,cB+u3,cE+v3,kBE,A,Eb,ub,alpha4,alpha5,alp
ha6,alpha7,r4_H2_B,r5_CO_B,r6_CH4_B,r7_B,net_flow)');

    v4=paso*eval('yy(a_b,z+paso,cB+u3,cE+v3,kBE,A,Eb,Emf,umf,alpha1,alpha
2,alpha3,alpha4,alpha5,alpha6,alpha7,alpha8,r4_H2_E,r5_CO_E,r6_CH4_E,
r1_E,r2_E,r3_E,r7_E,r8_E,as,net_flow)');

    %condición de no negatividad e implementación de RK4
    for r=1:7

        if cB(r)>0 % si el valor inicial de la nueva concentración es
positivo se realiza calculo
            cB(r)=cB(r)+(1/6)*(u1(r)+2*u2(r)+2*u3(r)+u4(r));
        end

        if cE(r)>0
            cE(r)=cE(r)+(1/6)*(v1(r)+2*v2(r)+2*v3(r)+v4(r));
        end

        if cB(r)<=0

```

Análisis de la estrategia de modelado de gasificadores de biomasa en lecho fluidizado

```
cB(r)=0;
end

if cE(r)<=0
    cE(r)=0;
end

end

end

%Cálculo de la conversión de char por piso y del error asociado
conv=(1-caud_char(num_pisos)/f_char0)/num_pisos;
error=(conv_char_sup-conv)/conv_char_sup;

end

%Conversión de char total
conversion=conv*num_pisos;

% Fracciones molares a cada altura del reactor
xCO_B=[xCO_Bin,xCO_B];
xCO_E=[xCO_Ein,xCO_E];
xCO=[xCO_B;xCO_E];
xH2_B=[xH2_Bin,xH2_B];
xH2_E=[xH2_Ein,xH2_E];
xH2=[xH2_B;xH2_E];
xCO2_B=[xCO2_Bin,xCO2_B];
xCO2_E=[xCO2_Ein,xCO2_E];
xCO2=[xCO2_B;xCO2_E];
xCH4_B=[xCH4_Bin,xCH4_B];
xCH4_E=[xCH4_Ein,xCH4_E];
xCH4=[xCH4_B;xCH4_E];
xO2_B=[xO2_Bin,xO2_B];
xO2_E=[xO2_Ein,xO2_E];
xO2=[xO2_B;xO2_E];
xH2O_B=[xH2O_Bin,xH2O_B];
xH2O_E=[xH2O_Ein,xH2O_E];
xH2O=[xH2O_B;xH2O_E];
xTOT_B=[xTOT_Bin,xTOT_B];
xTOT_E=[xTOT_Ein,xTOT_E];
xTOT=[xTOT_B;xTOT_E];
xN2_B=[xN2_Bin,xN2_B];
xN2_E=[xN2_Ein,xN2_E];
xN2=[xN2_B;xN2_E];
xBubble=[xCO_B;xH2_B;xCO2_B;xCH4_B;xO2_B;xN2_B;xH2O_B;xTOT_B];
xEmulsion=[xCO_E;xH2_E;xCO2_E;xCH4_E;xO2_E;xN2_E;xH2O_E;xTOT_E];
xCO=xCO_B*(Eb)+xCO_E*(1-Eb);
xH2=xH2_B*(Eb)+xH2_E*(1-Eb);
xCO2=xCO2_B*(Eb)+xCO2_E*(1-Eb);
xCH4=xCH4_B*(Eb)+xCH4_E*(1-Eb);
xO2=xO2_B*(Eb)+xO2_E*(1-Eb);
xN2=xN2_B*(Eb)+xN2_E*(1-Eb);
xH2O=xH2O_B*(Eb)+xH2O_E*(1-Eb);

% Fracciones molares a la salida del reactor
```

Análisis de la estrategia de modelado de gasificadores de biomasa en lecho fluidizado

```
xTOT_BE=[xH2(num_pisos) xN2_B(num_pisos) xO2(num_pisos)
xCO(num_pisos) xCO2(num_pisos) xH2O(num_pisos) xCH4(num_pisos)
conversion xTOT(num_pisos)]

% Calculo del PCI. Heating Value
PM=[28 2 44 16 32 28 18]*1E-3; % Pesos moleculares de los elementos
(kg/mol)
Mkg=[fCO_E(num_pisos)+fCO_B(num_pisos)
fH2_E(num_pisos)+fH2_B(num_pisos) fCO2_E(num_pisos)+fCO2_B(num_pisos)
fCH4_E(num_pisos)+fCH4_B(num_pisos) fO2_E(num_pisos)+fO2_B(num_pisos)
fN2_E(num_pisos)+fN2_B(num_pisos)
fH2O_E(num_pisos)+fH2O_B(num_pisos)];
PC=[8.4 142 50.2] ; % (MJ/Kg)
MPC=[Mkg(1) Mkg(2) Mkg(4)]; % (Kg)
MMJ=MPC.*PC; % MJ
Q2=(Q_aire_real/T)*(273+20); % Caudal Q2 normal 20 °C y 1atm (m3/s)
HV=sum(MMJ)/Q2; % (MJ/m3)
%-----
```